

Министерство образования и науки Российской Федерации

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
«УРАЛЬСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМЕНИ ПЕРВОГО ПРЕЗИДЕНТА РОССИИ Б.Н.ЕЛЬЦИНА»

УДК 537.9

Код ГРНТИ 29.19.22

№ госрегистрации 01200905504

УТВЕРЖДАЮ
Ректор
к.и.н. В.А.Кокшаров

(подпись)

“15” июля 2011 г.

М.П.

ОТЧЕТ

по государственному контракту: № 02.740.11.0217 «Исследование и прогнозирование фундаментальных свойств сильнокоррелированных магнитных материалов, перспективных для принципиально новых устройств электроники» федеральной целевой программы «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» (2009-2013 годы)

мероприятие: 1.1 Проведение научных исследований коллективами научно-образовательных центров

тема: «Проведение научных исследований коллективами научно-образовательных центров в области физики конденсированных сред, физического материаловедения».

вид отчета: заключительный

Руководитель проекта:

доктор физико-математических наук,
профессор, Мазуренко В.Г.

г. Екатеринбург 2011 г.

СПИСОК ИСПОЛНИТЕЛЕЙ

Научный руководитель, д.ф.-м.н., профессор	<u>15.07.2011</u> подпись, дата	Мазуренко В.Г. (раздел(ы)) 1-5 Приложения А, Б, В, Г
Исполнители		
Профессор, д.ф.-м.н.	<u>15.07.2011</u> подпись, дата	Анисимов В.И. (раздел(ы)) 1
Профессор, д.ф.-м.н.	<u>15.07.2011</u> подпись, дата	Зверев В.В. (раздел(ы)) Приложение Б
Профессор, д.ф.-м.н.	<u>15.07.2011</u> подпись, дата	Огородников И.Н. (раздел(ы)) 1
Профессор, д.ф.-м.н.	<u>15.07.2011</u> подпись, дата	Пустоваров В.А. (раздел(ы)) 1
докторант, к.ф.-м.н.	<u>15.07.2011</u> подпись, дата	Мазуренко В.В. (раздел(ы)) 1-5
докторант, к.ф.-м.н.	<u>15.07.2011</u> подпись, дата	Кузнецов А.Ю. (раздел(ы)) 1
Старший научный сотрудник, к.ф.-м.н.	<u>15.07.2011</u> подпись, дата	Руденко А.Н. (раздел(ы)) 1
Старший научный сотрудник, к.ф.-м.н.	<u>15.07.2011</u> подпись, дата	Скорняков С.Л. (раздел(ы)) 1
доцент, к.ф.-м.н.	<u>15.07.2011</u> подпись, дата	Зенков Е.В. (раздел(ы)) 1
доцент, к.ф.-м.н.	<u>15.07.2011</u> подпись, дата	Иванов В.Ю. (раздел(ы)) 1
доцент, к.ф.-м.н.	<u>15.07.2011</u> подпись, дата	Байтимиров Д.Р. (раздел(ы)) 1
доцент, к.ф.-м.н.	<u>15.07.2011</u> подпись, дата	Катанин А.А. (раздел(ы)) 1,4
доцент, к.ф.-м.н.	<u>15.07.2011</u> подпись, дата	Шориков А.О. (раздел(ы)) 1
Старший научный сотрудник, к.ф.-м.н.	<u>15.07.2011</u> подпись, дата	Лукоянов А.В. (раздел(ы)) 1
доцент, к.ф.-м.н.	<u>15.07.2011</u> подпись, дата	Стрельцов С.В. (раздел(ы)) 1
Старший научный сотрудник,	<u>15.07.2011</u> подпись, дата	Соловьев И.В.

<i>к.ф.-м.н.</i>	подпись, дата	(раздел(ы)) 1
<i>Старший научный сотрудник,</i>	15.07.2011	<i>Лончаков А.Т.</i>
<i>к.ф.-м.н.</i>		(раздел(ы)) 1
<i>доцент, к.ф.-м.н.</i>	15.07.2011	<i>Смирнов А.А.</i>
		(раздел(ы)) 1
<i>Младший научный сотрудник</i>	15.07.2011	<i>Ищенко А.В.</i>
		(раздел(ы)) 1
<i>Аспирант</i>	15.07.2011	<i>Конев А.С.</i>
		(раздел(ы)) 1
<i>Младший научный сотрудник</i>	15.07.2011	<i>Коротин Д.М.</i>
		(раздел(ы)) 1
<i>Младший научный сотрудник</i>	15.07.2011	<i>Порывай Н.Е.</i>
	подпись, дата	(раздел(ы)) 1
<i>Аспирант</i>	15.07.2011	<i>Седунова И.Н.</i>
		(раздел(ы)) 1
<i>Младший научный сотрудник</i>	15.07.2011	<i>Искаков С.Н.</i>
		(раздел(ы)) 1
<i>Аспирант</i>	15.07.2011	<i>Макаров А.С.</i>
		(раздел(ы)) 1
<i>Магистрант</i>	15.07.2011	<i>Давыдова А.О.</i>
	подпись, дата	(раздел(ы)) 1
<i>Студент</i>	15.07.2011	<i>Квашнин Я.О.</i>
		(раздел(ы)) 1
<i>Студент</i>	15.07.2011	<i>Николаев С.А.</i>
		(раздел(ы)) 1
<i>Магистрант</i>	15.07.2011	<i>Валентюк М.В.</i>
		(раздел(ы)) 1
<i>Студент</i>	15.07.2011	<i>Набокова Т.А.</i>
		(раздел(ы)) 1
<i>Студент</i>	15.07.2011	<i>Кашин И.В.</i>
		(раздел(ы)) 1
<i>Нормоконтролер</i>	15.07.2011	<i>Байтимиров Д.Р.</i>
	подпись, дата	

Реферат

Отчет 96 с., 5 ч., 30 рис., 1 табл., 12 источников, 4 прил.

МАТЕРИАЛЫ СПИНТРОНИКИ, МИКРОЭЛЕКТРОНИКА, МОДЕЛИРОВАНИЕ, ФУНКЦИОНАЛ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ, КОРРЕЛЯЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ, ФОТОЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ, ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И ТЕРМОМАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА

Объектом исследований являются материалы спинтроники.

Цель работы - решение ряда фундаментальных, методических и практических задач, связанных с теоретическим и экспериментальным исследованиями и описанием необычных электронных, магнитных, термоэлектрических и термоманитных свойств материалов спинтроники, которые станут основой для создания новых прорывных технологий в электронике.

В процессе работы проводились теоретические и экспериментальные исследования конкретных физических систем. Для соединения FeSi и системы твердых растворов $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ предложена модель коррелированного зонного изолятора, позволившая впервые правильно воспроизвести весь спектр экспериментальных данных. Впервые в рамках квантового гамильтониана с использованием теории линейного отклика проведено реалистичное моделирование проводимости отдельных атомов кобальта на поверхности Pt(111).

Среди практических результатов можно выделить комплексные экспериментальные исследования продольного эффекта Нернста-Эттингсгаузена в твердом растворе $\text{Hg}_{1-x}\text{Co}_x\text{Se}$ и сплаве Гейслера $\text{Fe}_{2-x}\text{V}_{1+x}\text{Al}$. Кроме того, методом спектроскопии возбуждения фотолюминесценции получена новая информация о глубоких электронных состояниях в валентной зоне материалов спинтроники на основе полупроводников ZnO:3d.

Сделан значительный вклад в модернизацию и развитие учебного процесса через разработку плана внедрения результатов НИР в учебный процесс. Методические и практические результаты проекта были использованы для модернизации специализированных лекционных курсов, читаемых для студентов и магистров физико-технологического института ФГАОУ ВПО «УрФУ имени первого Президента России Б.Н.Ельцина».

Содержание

Определения, обозначения и сокращения.....	7
Введение.....	8
Основная часть.....	10
1 Научные и научно-технические результаты пятого этапа (Экспериментальное и теоретическое исследование физических свойств материалов спинтроники (твердых растворов)).....	10
1.1 Проведение расчетов электронной структуры твердых растворов на основе Fe, Co, Mn, Si, Ge, Sb, Te.....	10
1.1.1 Моделирование электронной структуры соединений FeSi и FeGe.....	10
1.1.2 Трехзонная модель для описания электронных свойств соединения FeSi.....	15
1.1.3 Описание корреляционных эффектов в соединении FeSi и в твердых растворах FeCoSi.....	19
1.1.4 Исследование магнитных и электронных свойств семейства твердых растворов FeMnSi.....	21
1.2 Проведение расчетов физических свойств твердых растворов на основе Fe, Co, Mn, Si, Ge, Sb, Te.....	23
1.2.1 Орбитальная поляризация спектра проводимости атома кобальта, помещенного на платиновую поверхность.....	23
1.3 Разработка программы внедрения результатов НИР в образовательный процесс.....	26
1.4 Экспериментальное исследование атомной структуры, оптических и др. свойств на основе Fe, Co, Mn, Si, Ge, Sb, Te.....	32
1.4.1 Термоэлектрические и термомагнитные свойства твердого раствора $\text{Hg}_{1-x}\text{Co}_x\text{Se}$ и сплава Гейслера $\text{Fe}_{2-x}\text{V}_{1+x}\text{Al}$	32
1.4.2 Фотолюминесценции и возбуждения фотолюминесценции твердых растворов $\text{Zn}_{1-x}\text{Co}_x\text{O}$, $\text{Zn}_{1-x}\text{Ni}_x\text{O}$ и $\text{Zn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}$	37
2 Подготовка кадров высшей квалификации.....	46
3 Список статей, опубликованных членами творческого коллектива за отчетный период.....	46

4 Список работ коллектива, направленных в журналы для публикации.....	47
5 Доклады членов творческого коллектива на конференциях.....	47
Заключение.....	48
Список использованных источников.....	51
ПРИЛОЖЕНИЕ А Акты внедрения результатов НИР в учебный процесс.....	52
ПРИЛОЖЕНИЕ Б Основная образовательная программа высшего профессионального образования подготовки бакалавров по направлению 010900 – Прикладные математика и физика, профиль «Физика конденсированного состояния живых и неживых систем».....	55
ПРИЛОЖЕНИЕ В Выходные данные учебных пособий.....	84
ПРИЛОЖЕНИЕ Г Учебные планы специальностей 010900 Прикладные математика и физика, профиль «Физика конденсированного состояния живых и неживых систем», и 140800 Ядерные физика и технологии, профиль «Физика конденсированного состояния».....	88

Определения, обозначения и сокращения

LDA - Local Density Approximation – Приближение локальной плотности

LMTO - линейные маффин-тин орбитали

PWSCF - псевдопотенциальный метод

GGA - обобщенная градиентная поправка

НЭ - эффект Нернста-Эттингсгаузена

Введение

Одной из бурно развивающихся в настоящее время технологий является спинтроника. Она объединяет множество областей знаний и приходит на смену традиционной электронике. Среди основных преимуществ устройств, созданных или еще проектируемых на этой технологии, можно выделить следующие свойства: энергоэффективность, меньшие физические объемы, скорость выполнения вычислительных операций. В рамках данного этапа проекта нами были проведены комплексные исследования материалов спинтроники с использованием современных теоретических и экспериментальных методов. Первоначальный список объектов исследования (твердые растворы) был значительно расширен и в него были включены такие объекты как отдельные атомы переходных металлов на поверхности, сплавы Гейслера и полупроводники с примесями переходных металлов.

К наиболее важным результатам этапа проекта мы можем отнести построение микроскопической трехзонной модели для соединения FeSi. Эта модель не только дает глубокое понимание процессов формирования электронной структуры и магнитных свойств системы FeSi, но и может быть использована для анализа экспериментальных спектров различных семейств твердых растворов $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ и $\text{Fe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Si}$.

Еще одним важным результатом проекта, который имеет прямое отношение к технологии стало моделирование проводимости в системе Co/Pt(111). Результаты предсказательного моделирования продемонстрировали возможность манипулирования отдельными 3d состояниями атома кобальта. Это открывает широкие перспективы по проектированию и созданию новых квантовых устройств (логических реле, квантовых битов) на базе отдельных атомов. И в дальнейшем может привести к возникновению нового направления исследований.

В ходе выполнения этапа проекта также совершенствовалась программная инфраструктура. Так были разработаны новые численные схемы для диагонализации сверхбольших матриц, позволяющие максимально эффективно использовать оперативную память многоядерных систем. Это позволило проводить

реалистичное моделирование объектов исследования в рамках многочастичных квантовых методов.

Кроме того, был сделан значительный вклад в модернизацию и развитие учебного процесса через разработку программы внедрения результатов НИР в учебный процесс. Разработанная программа внедрения - это совокупность взаимоувязанных основных и дополнительных образовательных программ нескольких ступеней образования (бакалавриат, специалитет, магистратура, аспирантура) и соответствующих им образовательных технологий, которые определяют содержание образования и направлены на достижение плановых показателей деятельности УрФУ.

За время выполнения проекта были подготовлены следующие промежуточные отчеты:

- Промежуточный отчет за первый этап по теме «Создание методической базы»;
- Промежуточный отчет за второй этап по теме «Исследование физических свойств магнитных наноматериалов»;
- Промежуточный отчет за третий этап по теме «Исследование электронной и магнитной структур сильнофрустрированных квантовых магнетиков»;
- Промежуточный отчет за четвертый этап по теме «Моделирование физических свойств мультиферроиков и их экспериментальная проверка».

Основная часть

1 Научные и научно-технические результаты пятого этапа (Экспериментальное и теоретическое исследование физических свойств материалов спинтроники (твердых растворов))

1.1 Проведение расчетов электронной структуры твердых растворов на основе Fe, Co, Mn, Si, Ge, Sb, Te

1.1.1 Моделирование электронной структуры соединений FeSi и FeGe

Изучение физических свойств систем, содержащих атомы Fe, Co, Si и Ge представляет не только фундаментальный интерес, но и является важным с точки зрения прикладных исследований поскольку они демонстрируют необычные транспортные и магнитные свойства, которые могут быть использованы в новых технологиях. Так, например, ряд систем, $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ и MnSi вызывают живой интерес у исследователей в связи с открытием в этих системах новой магнитной фазы с топологическими возбуждениями (скирмионами). При достаточной плотности таких объектов возникают эффективные магнитные поля огромной величины (4000 Тл), которые оказывают значительное влияние на движение электронов. Экспериментальные данные по топологическим спиновым текстурам и их модели в геликоидальной магнетике $\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Si}$ могут быть изображены в соответствии с рисунком 1.

Соединения FeGe и FeSi при нормальных условиях – это узкозонные полупроводники со щелью, формируемой гибридованными 3d состояниями железа, как и в соединениях FeSb_2 , FeGa_3 , Fe_2VAl . В системе FeSi экспериментально обнаружен переход от полупроводника с небольшой щелью (~60 мэВ) к плохому металлу с ростом температуры. При замещении ионов железа ионами кобальта это соединение становится ферромагнитным металлом. В соединении FeGe предполагается переход от ферромагнитного металла к немагнитному полупроводнику. Для объяснения необычных свойств этой системы ранее были предложены различные теоретические модели, в том числе модель Кондо диэлектрика и модель с узкими пиками вблизи уровня Ферми.

Однако упомянутые модели предполагают слабую гибридизацию 3d-

состояний железа с остальными состояниями и плохо согласуются с зонной структурой реального соединения.

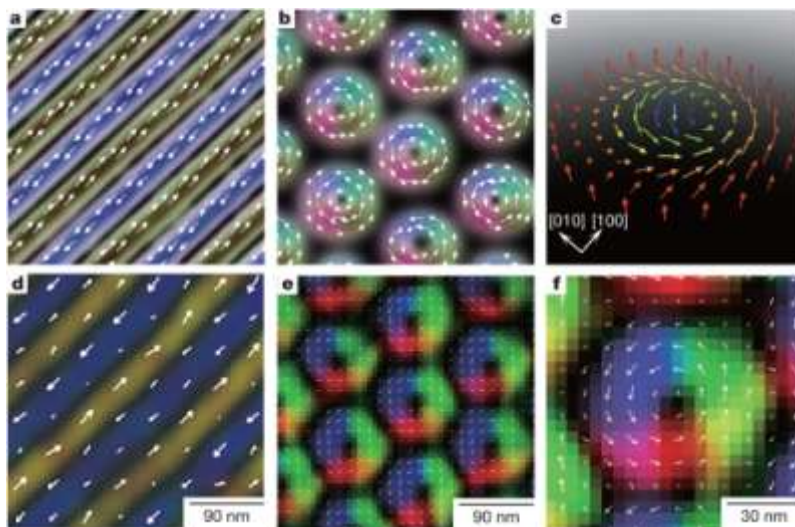


Рисунок 1 - Экспериментальные топологические спиновые текстуры (нижние рисунки, изображения распределений намагниченности в реальном пространстве получены из данных просвечивающего (трансмиссионного) электронного микроскопа) и их модели в геликоидальном магнетике $\text{Fe}_{0.5}\text{Co}_{0.5}\text{Si}$ [1].

a, d – геликоидальная структура при нормальных условиях;

b, e – магнитные структуры, возникающие при приложении магнитного поля (50 мТ).

На данном этапе были проведены исследования электронной структуры систем Fe-Si и Fe-Ge при помощи зонных методов, а также исследовано влияние эффектов гибридизации при построении гамильтонианов малой размерности методом проектирования на базис функций Ванье.

При расчетах использовали следующие данные по кристаллической структуре FeGe: группа симметрии: $P2_13$, постоянная решетки составляет 4.7 ангстрем. Позиции Fe $X=0.1352, 0.1352, 0.1352$; Ge $X=0.8414, 0.8414, 0.8414$ [2].

Для указанной кристаллической структуры были проведены расчеты электронной структуры в рамках приближения LDA в пакете программ TB-LMTO-ASA, использующем базис LMTO. Для расчетов использовались следующие

электронные конфигурации ионов: для Fe - 4s4p3d, для Ge — 4s4p4d, для Si — 3s3p3d. Интегрирование производилось по сетке **k**-точек 10x10x10.

Рассчитанные полная и парциальные плотности электронных состояний системы FeGe могут быть представлены в соответствии с рисунком 2. Расчетная зонная структура системы FeSi имеет вид в соответствии с рисунком 3.

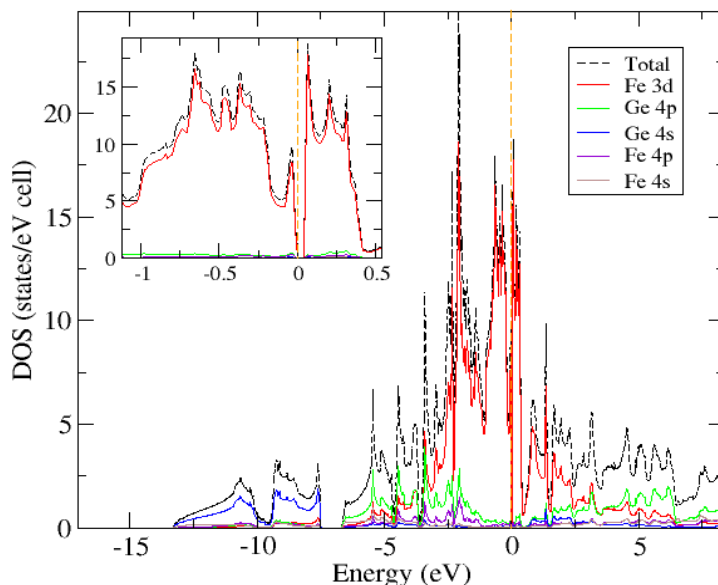


Рисунок 2 - Полная и парциальные плотности электронных состояний системы FeGe, полученные в рамках приближения LDA в пакете программ TB-LMTO-ASA.

Уровень Ферми располагается в нуле энергии.

Полная плотность электронных состояний вблизи уровня Ферми составлена, главным образом, 3d состояниями ионов железа, образующими широкую зону от -8 до 7 эВ. Состояния Fe 3d сильно гибридизованы с Si (Ge) p состояниями в широком диапазоне энергий. В результате расчета оба соединения оказались полупроводниками с малой энергетической щелью 0.4 эВ (FeSi) и 0.04 эВ (FeGe).

С целью подтверждения результатов расчетов, полученных в рамках LMTO подхода, электронная структура этих соединений была также вычислена в рамках псевдопотенциального метода PWSCF, использующего базис плоских волн и реализованного в пакете программ Quantum Espresso.

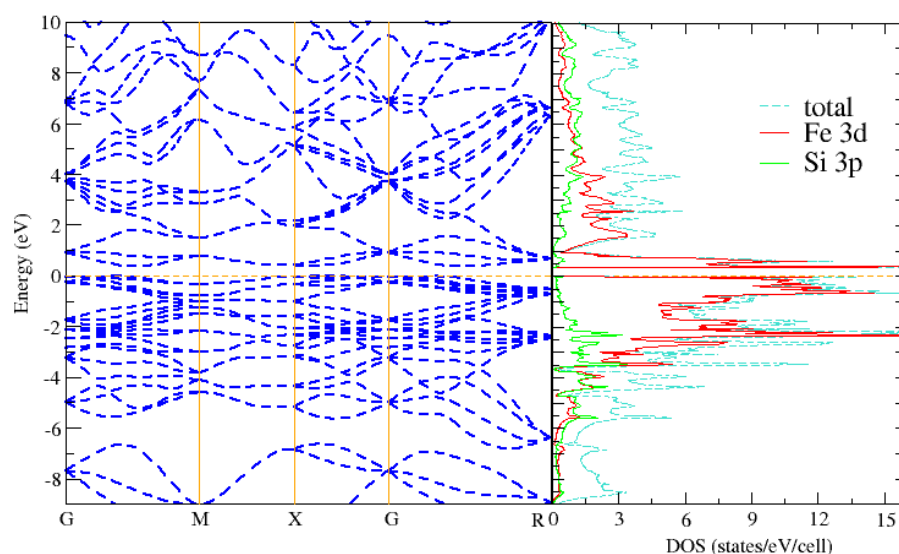


Рисунок 3 - Зонная структура (слева), полная и парциальные плотности электронных состояний (справа) системы FeSi, полученные в рамках приближения LDA в пакете программ TB-LMTO-ASA. Уровень Ферми располагается в нуле энергии.

Для обменно корреляционного потенциала в приближении GGA версии Педью–Бурке–Эрцэрхофа была использована форма Раппе-Рабе-Каксирас Йонополуса. Интегрирование по зоне Бриллюэна осуществлялось по сетке $15 \times 15 \times 15$ **k** точек обратного пространства. Для кинетической энергии использовалась предельная энергия 45 ридбергов при разложении плоских волн электронных состояний. Рассчитанные полная и парциальные плотности электронных состояний, а также зонная структура в описанном подходе для соединения FeSi могут быть представлены в соответствии с рисунками 4 и 5.

По аналогичной методике были проведены расчеты электронных состояний системы FeGe. Полученные полная и парциальная (Fe 3d) плотности электронных состояний соединения FeGe могут быть представлены в соответствии с рисунком 6.

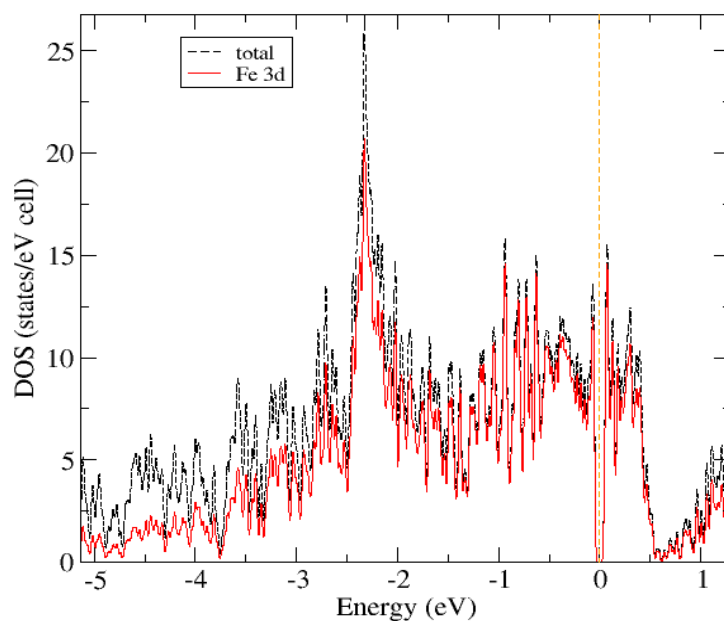


Рисунок 4 - Полная и парциальная Fe 3d плотности электронных состояний соединения FeSi, полученные в рамках приближения GGA в пакете программ Quantum Espresso. Уровень Ферми располагается в нуле энергии.

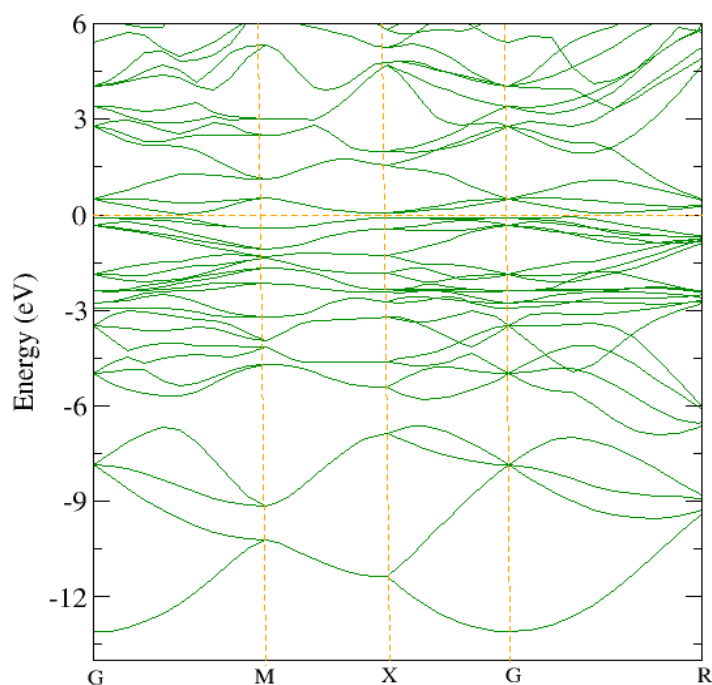


Рисунок 5 - Зонная структура соединения FeSi, рассчитанная в рамках приближения GGA в пакете программ Quantum Espresso. Уровень Ферми располагается в нуле энергии.

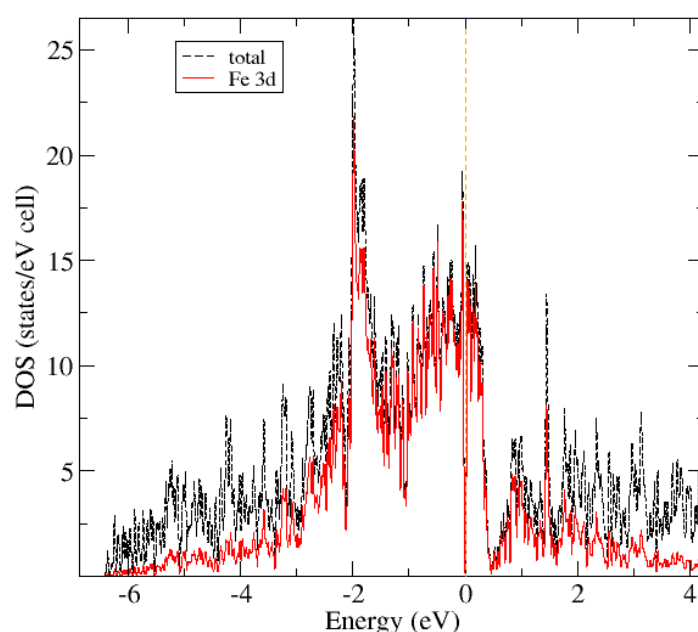


Рисунок 6 - Полная и парциальная Fe 3d плотности электронных состояний соединения FeGe, полученные в рамках приближения GGA в пакете программ Quantum Espresso. Уровень Ферми располагается в нуле энергии.

На данном этапе было проведено построение гамильтонианов малой размерности методом проектирования на базис функций Ванье в рамках пакета программ Quantum Espresso. Гамильтониан малой размерности строился для всех состояний, включенных в исходный псевдопотенциал, причем результирующая размерность гамильтониана составила 52×52 . Для каждого иона железа использовалась локальная система координат, в которой блок гамильтониана, соответствующий 3d состояниям, будучи просуммированным по k-точкам, диагонален. Построенный гамильтониан будет использоваться в расчетах в рамках теории динамического среднего поля с целью описать корреляционные эффекты в системах FeSi и FeGe.

1.1.2 Трехзонная модель для описания электронных свойств соединения FeSi

Несмотря на простую химическую формулу соединение FeSi имеет сложную геометрию и как следствие зонный спектр данной системы вблизи уровня Ферми также сложен для анализа. Поскольку большинство наблюдаемых свойств данного

соединения обусловлены электронными и магнитными возбуждениями вблизи уровня Ферми необходимо построить модель, которая бы воспроизводила основные особенности полного зонного спектра – узкую энергетическую щель и узкий пик выше уровня Ферми. В этом отношении нам пригодились результаты работы [3], в которой авторы рассмотрели высокосимметричную фазу соединения FeSi с кристаллической структурой поваренной соли. Было показано, что в фазе поваренной соли система демонстрирует основные особенности зонного спектра FeSi в тоже время электронный спектр более подходит для теоретического анализа. Зонные спектры, полученные с использованием реальной кристаллической структуры соединения FeSi, фазы поваренной соли и двух переходных структур имеют вид в соответствии с рисунком 7.

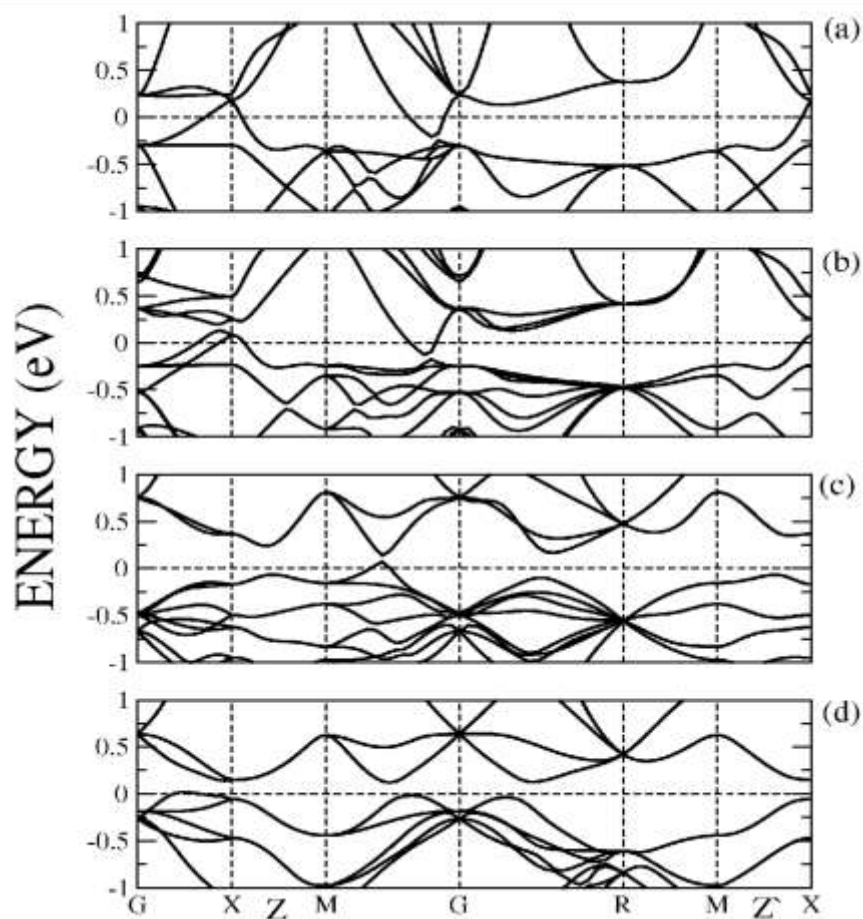


Рисунок 7 - Дисперсионные кривые соединения FeSi, находящегося в разных структурных фазах, полученные из LDA расчетов. (a) Структура поваренной соли. (b-c) Переходные структуры. (d) Экспериментально наблюдаемая кристаллическая структура.

Видно, что в фазе поваренной соли энергетическая щель открыта во всех высокосимметричных направлениях за исключением направления GM. Важно отметить, что переход от состояния с псевдощелью в фазе поваренной соли к состоянию с узкой запрещенной зоной в реальной кристаллической структуре осуществляется за счет искажений кристаллической решетки.

Следующим шагом исследования стало изучение механизмов, отвечающих за формирование псевдощели в фазе поваренной соли. Для этого были выполнены модельные расчеты, в которых мы искусственно изменяли величину гибридизации между 3d состояниями железа и 3s и 3p состояниями кремния. Такие манипуляции с гамильтонианом позволили классифицировать все зоны вблизи уровня Ферми на те, которые возникают за счет сильной и слабой гибридизации между 3d состояниями железа и 3s, 3p состояниями кремния.

Проведенные первопринципные расчеты позволили нам предложить простую трехзонную модель, воспроизводящую основной физический эффект – открытие щели в высокосимметричном направлении LG. Схематичное изображение модели может быть представлено в соответствии с рисунком 8. В этой модели представлены два вида атомов, которые мы ассоциируем с атомами железа и кремния в реальной структуре.

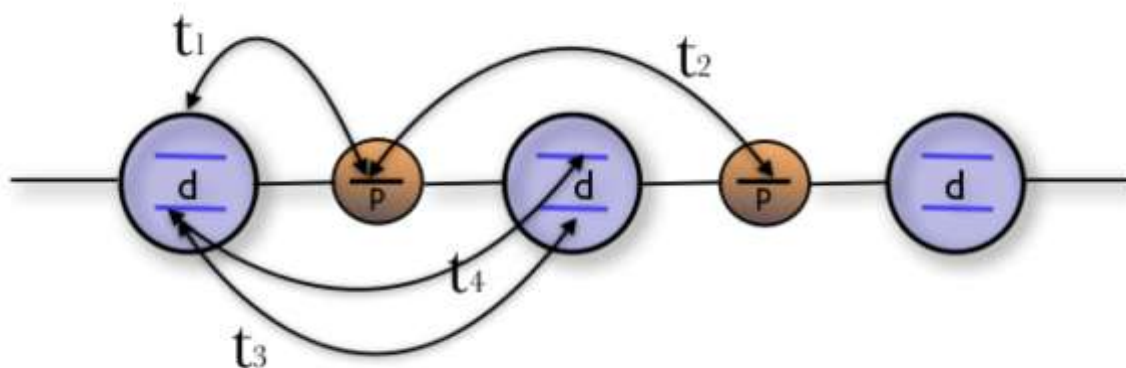


Рисунок 8 - Схематичное изображение трехзонной модели, предложенной для описания соединения FeSi. Синие и коричневые окружности представляют атомы железа и кремния, соответственно.

Подгонка параметров переноса электронов между эффективными орбиталями позволила максимально точно воспроизвести поведение LDA спектра в высокосимметричном направлении LG в соответствии с рисунком 9.

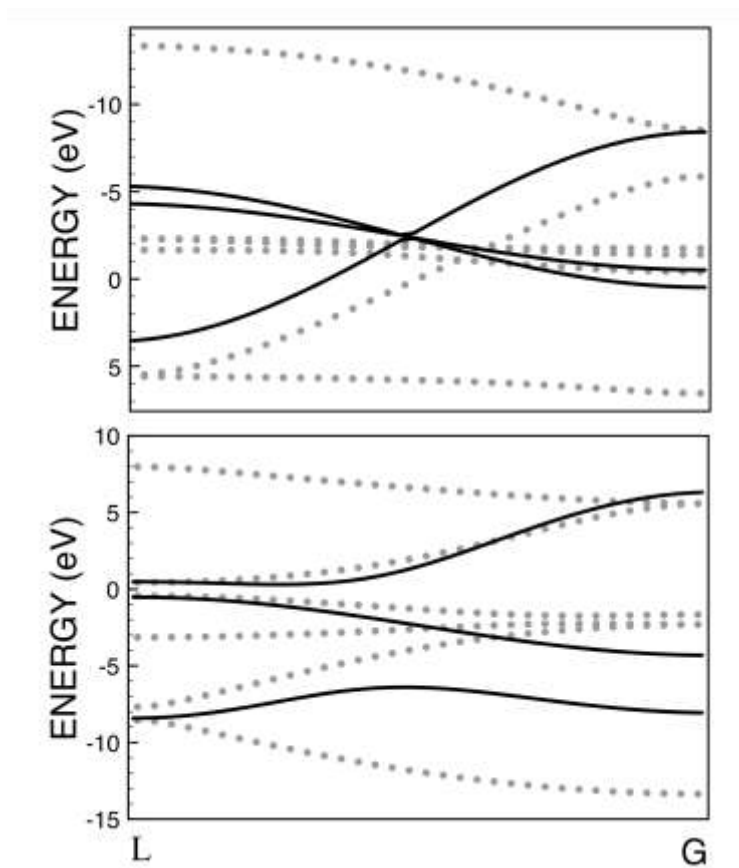


Рисунок 9 - Сравнение модельной зонной структуры (сплошная линия) с зонным спектром полного LDA расчета.

В соответствии с рисунком 9 можно заключить, что в рамках модели удастся воспроизвести влияние гибридационных эффектов на электронный спектр. С использованием предложенной модели мы теперь можем по-новому взглянуть и проанализировать сложный зонный спектр соединения FeSi с реальной кристаллической структурой. На нем также можно видеть зоны, соответствующие различным степеням гибридизации между 3d состояниями железа и 3s(3p) состояниями кремния.

Таким образом, в рамках проведенного исследования нами была предложена простая и наглядная модель, воспроизводящая основные особенности сложного зонного спектра соединения FeSi.

1.1.3 Описание корреляционных эффектов в соединении FeSi и в твердых растворах FeCoSi

Предложенная в пункте 1.1.2 трехзонная модель дает широкие возможности по моделированию корреляционных эффектов как в соединении FeSi, так и различных системах твердых растворов, например $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$. В рамках данного этапа проекта нами было проведено моделирование электронной и магнитной структуры этих систем с использованием методов теории динамического среднего поля (DMFT). Для решения примесной задачи модели Андерсона мы использовали метод точной диагонализации и квантовый метод Монте Карло, которые позволяют описывать систему в различных диапазонах температур.

Основной результат проведенного исследования может быть представлен в соответствии с рисунком 10.

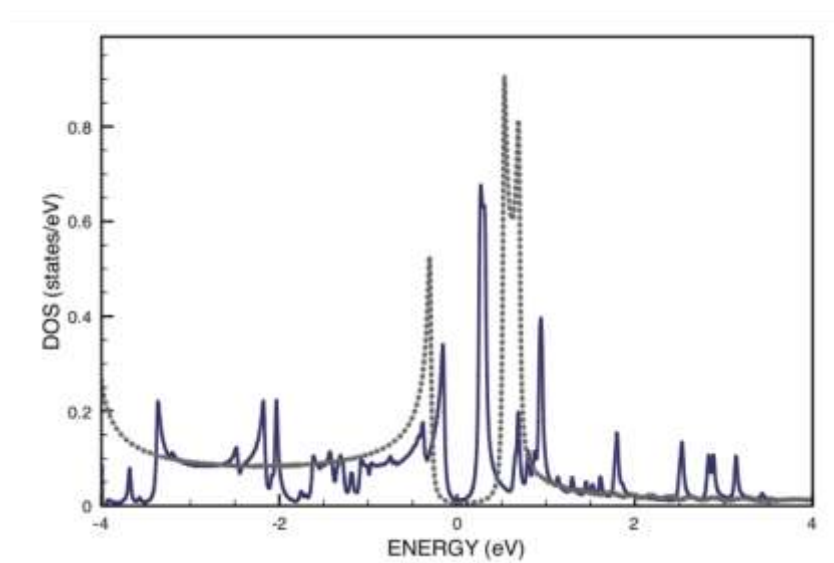


Рисунок 10 - Спектральные функции трехзонной модели FeSi, полученные в рамках DMFT расчетов. Сплошная и пунктирные линии соответствуют системе с учетом и без учета кулоновского взаимодействия.

Спектральная функция трехзонной модели соединения FeSi с учетом кулоновского взаимодействия демонстрирует сужение спектра вблизи уровня Ферми и формирование верхней и нижней хаббардовских зон. Для количественной оценки корреляционных эффектов был вычислен параметр перенормировки. Его

величина $m^*=2$ находится в хорошем согласии с результатами последних экспериментов по фотоэмиссионной спектроскопии с угловым разрешением [4].

Для моделирования семейства твердых растворов $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ нами была рассмотрена допированная версия трехзонной модели. Наибольший интерес представляет система с 10% допированием, для которой был обнаружен гигантский аномальный эффект Холла [5]. Для его описания необходимо решить квантовый гамильтониан с учетом спин-орбитального взаимодействия и вычислить двухчастичные функции Грина, соответствующие проводимости. Поскольку учет всех 3d состояний в рамках квантового гамильтониана представляет собой сложную вычислительную задачу, то первым наиболее естественным шагом является решение упрощенной модели, которая, тем не менее содержит основную информацию о полной системе. В проекте нами была решена трехзонная модель с допированием при помощи теории динамического среднего поля при низких температурах. Вычисленные плотности состояний атомов переходных металлов, полученные в рамках DMFT расчетов для трехзонной модели с допированием имеют вид в соответствии с рисунком 11. Видно, что как и в случае модели FeSi происходит перенормировка спектральных функций вблизи уровня Ферми.

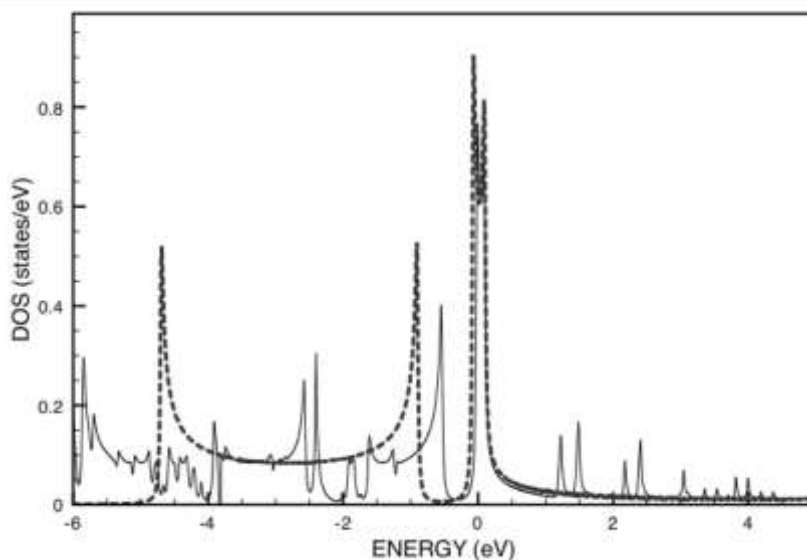


Рисунок 11 - Плотности состояний атомов переходных металлов, полученные в рамках DMFT расчетов для трехзонной модели с допированием (сплошная линия). Пунктирная линия соответствует модели без учета кулоновского взаимодействия.

Наблюдаемая в численном моделировании перенормировка электронного спектра позволяет объяснить малую величину магнитного момента, наблюдаемого в эксперименте.

1.1.4 Исследование магнитных и электронных свойств семейства твердых растворов FeMnSi

Твердые растворы на основе атомов Fe, Mn и Si также демонстрируют необычные физические явления, имеющие как фундаментальное, так и прикладное значение. Так для системы твердых растворов $\text{Fe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Si}$ авторы работы [6], основываясь на измерениях проводимости, восприимчивости и намагниченности в различных магнитных полях, сделали вывод о существовании “недокомпенсированного эффекта Кондо». Согласно предложенному сценарию электронов проводимости слишком мало, чтобы полностью скомпенсировать хорошо локализованный магнитный момент примеси. Несмотря на всю важность этих экспериментальных данных для спинтроники, их теоретических анализ и объяснение к моменту выполнения проекта проведены не были.

За отчетный этап мы провели моделирование электронных и магнитных свойств семейства твердых растворов $\text{Fe}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Si}$ с использованием методов виртуального кристалла и суперячейки в рамках приближения локальной электронной плотности. Для определения локального магнитного состояния, формирующегося вокруг примеси марганца в кристалле FeSi, было проведено моделирование сверхъячейки, состоящей из 31 атома железа, 1 атома марганца и 32 атомов кремния. Наиболее важный результат этих расчетов заключается в том, что пространственное распределение магнитного момента примеси марганца имеет вид в соответствии с рисунком 12. Видно, что магнитный момент, привносимый в систему за счет замены атома железа на атом марганца, не локализован в пространстве, а “размазан” по большому числу атомов железа. Также наблюдаются осцилляции магнитного момента в зависимости от расстояния. Этот результат противоречит локализованной модели предложенной в работе [6].

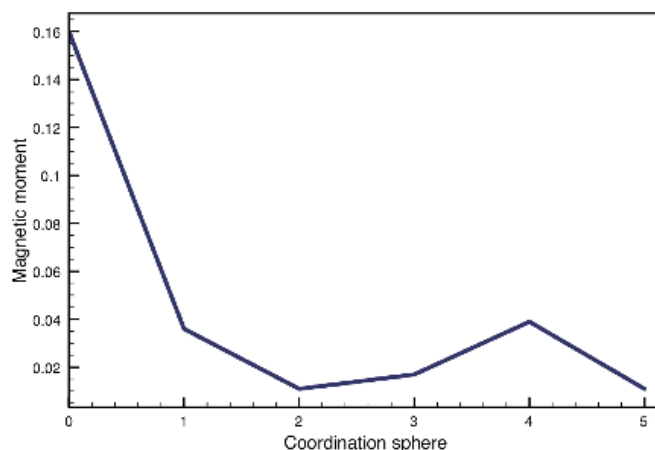


Рисунок 12 - Пространственное распределение магнитного момента примеси марганца.

С целью изучения физических свойств твердого раствора при других возможных концентрациях атомов марганца мы использовали приближение виртуального кристалла. Для выполнения этих исследований была использована линейная зависимость постоянной решетки твердого раствора от концентрации, что хорошо согласуется с экспериментальными результатами [5].

Полная плотность состояний твердого раствора $\text{Fe}_{0.7}\text{Mn}_{0.3}\text{Si}$, рассчитанная в рамках приближения виртуального кристалла имеет вид в соответствии с рисунком 13.

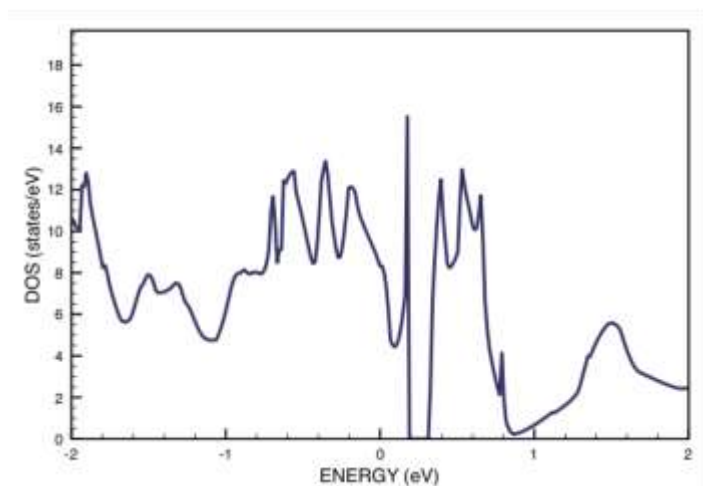


Рисунок 13 - Полная плотность состояний твердого раствора $\text{Fe}_{0.7}\text{Mn}_{0.3}\text{Si}$, рассчитанная в рамках приближения виртуального кристалла

Проведенные расчеты в рамках приближения локальной спиновой плотности показали, что магнитное состояние твердого раствора возникает, начиная с 40%

концентрации марганца. Этот результат противоречит экспериментальным данным, и, мы считаем, что это является следствием отсутствия учета квантовых флуктуаций в нашем подходе. Тем не менее, выполненное исследование является основой для проведения многочастичных расчетов, поскольку позволяет оценить параметры переноса электронов с узла на узел, необходимые для построения многочастичного гамильтониана Хаббарда.

1.2 Проведение расчетов физических свойств твердых растворов на основе Fe, Co, Mn, Si, Ge, Sb, Te

1.2.1 Орбитальная поляризация спектра проводимости атома кобальта, помещенного на платиновую поверхность

На предыдущих этапах проекта нами был достигнут значительный прогресс в понимании электронных и магнитных свойств наносистемы Co/Pt(111), которая играет важную роль в области спинтроники, поскольку обладает значительной энергией магнитной анизотропии. На данном этапе проекта нами была обнаружена значительная орбитальная поляризация спектра дифференциальной проводимости, связанная с локальной геометрией системы.

Первым шагом исследования стало определение чувствительности отдельных 3d состояний атома кобальта к включению внешнего магнитного поля. С этой целью нами была решена квантовая модель, в рамках которой был проведен учет состояний щупа микроскопа, примеси и подложки. Параметры для гамильтониана были определены при помощи первопринципных расчетов. Анализируя полученные значения намагниченности примесных состояний в соответствии с рисунком 14, мы сделали вывод о том, что наибольший отклик на внешнее магнитное поле демонстрируют локализованные $3z^2-r^2$ состояния. В свою очередь наиболее делокализованные состояния $yz(xz)$ симметрии, характеризуются наиболее слабым откликом.

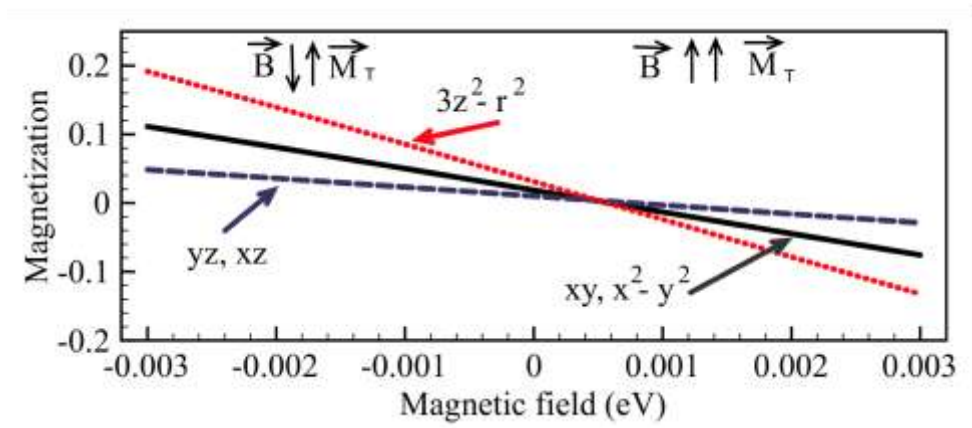


Рисунок 14 - Зависимость намагниченности различных состояний атома кобальта от внешнего магнитного поля.

Следующим шагом исследования стал расчет двухчастичных функций Грина с целью описания экспериментального спектра проводимости. Для этого в рамках теории линейного отклика мы рассмотрели различные виды возбуждений в соответствии с рисунком 15. Тензор проводимости содержит в себе большое число вкладов, связанных с различными видами возбуждений в квантовой системе. Нами был проведен отдельный анализ с целью выбора видов возбуждения, которые могут давать вклад в экспериментально наблюдаемый спектр.

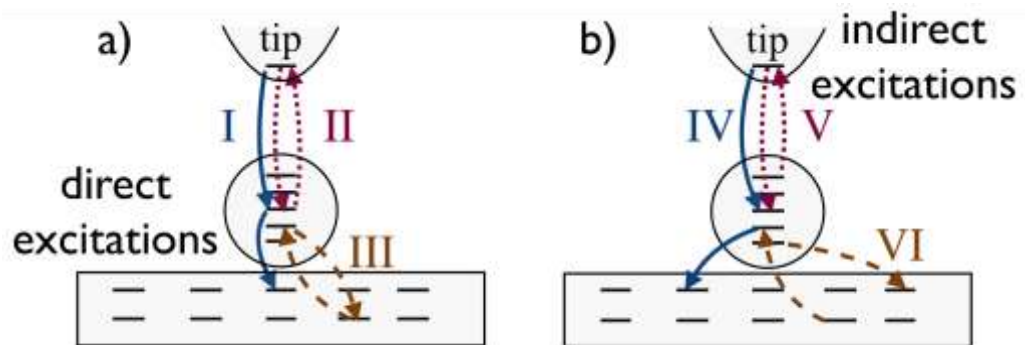


Рисунок 15 - Схематичное представление различных видов возбуждений, дающих вклад в тензор проводимости

Результирующие кривые проводимости имеют вид в соответствии с рисунком 16.

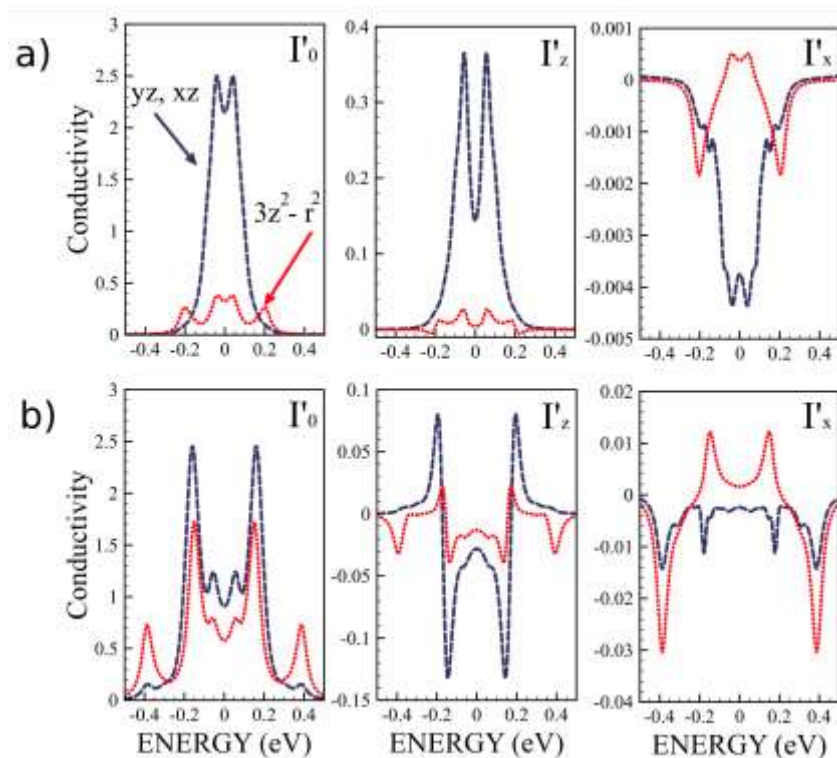


Рисунок 16 - Спектры проводимости, полученные в рамках теории линейного отклика

Здесь рассмотрены два случая: слабой и сильной гибридизации между состояниями щупа и примеси. Оба варианта могут быть реализованы экспериментально путем позиционирования щупа микроскопа на соответствующее расстояние от подложки. Видно, что в случае слабой гибридизации наибольший вклад в спин-поляризованную проводимость дают коллективизированные yz (xz) состояния кобальта. Уменьшение расстояния щуп-подложка приводит к тому, что спектр проводимости становится более изоляторным и локализованные $3z^2 - r^2$ состояния дают значительный вклад. Таким образом, мы делаем важный вывод о том, что в рамках экспериментов по сканирующей туннельной микроскопии возможно обращение к различным $3d$ состояниям атома переходного металла.

Предложенная численная схема расчета проводимости в настоящее время используется для моделирования транспортных свойств объемных кристаллов (FeSi, MnSi) и твердых растворов на основе атомов Fe, Co, Mn, Si, Ge.

По результатам проведенного исследования была подготовлена статья V.V. Mazurenko, S.N. Iskakov, M.V. Valentuyk, A.N. Rudenko, A.I. Lichtenstein “Orbital-selective conductivity of Co adatom on the Pt(111) surface”, которая была направлена для публикации в журнал Physical Review Letters (arXiv:1106.3702).

1.3 Разработка программы внедрения результатов НИР в образовательный процесс

Начиная с первого этапа выполнения проекта результаты научно-исследовательской работы, внедрялись в учебный процесс на уровне высшего профессионального образования по подготовке кадров по физическим направлениям физико-технологического института УрФУ имени первого Президента России Б.Н.Ельцина, а также для повышения квалификации аспирантов и молодых ученых в области физики конденсированного состояния вещества, физического материаловедения и подготовке научно-педагогических кадров. Достигалось это путем внедрения в учебный процесс в соответствии с учебным планом самостоятельной научно-исследовательской работы бакалавров, студентов, магистров, выполнением ими курсовых и дипломных работ, выпускных квалификационных работ бакалавров и магистерских диссертаций. Кроме того, результаты работ по проекту внедрялись в учебный процесс в виде дополнительных лекций и лабораторных работ в действующие лекционные курсы, таблица 1. Акты внедрения прилагаются, приложение А.

На заключительном этапе проекта была разработана программа внедрения результатов НИР в образовательный процесс в физико-технологическом институте УрФУ имени первого Президента России Б.Н.Ельцина. Разработанная программа внедрения может быть определена как совокупность взаимоувязанных основных и дополнительных образовательных программ нескольких ступеней образования (бакалавриат, специалитет, магистратура, аспирантура) и соответствующих им образовательных технологий, определяющих содержание образования и направленных на достижение планируемого результата деятельности УрФУ. Набор этих программ, их содержание и место внедрения представлены в таблице 1.

Таблица 1 - Программы и место внедрения результатов НИР

	Форма внедрения	Тип внедрения	Место внедрения
	1	2	3
1.	Образовательная программа подготовки бакалавров по направлению 010600 «Прикладные математика и физика» и образовательная программа подготовки специалистов по специальности 140302 «Физика атомного ядра и частиц», по курсу учебной дисциплины «Вычислительная физика».	<p>Дополнение в уже существующий курс в виде новых лекций и лабораторных занятий, в т.ч. <i>лекции по темам:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> - Использование объектно-ориентированного программного комплекса, объединяющего первопринципные методики описания свойств основного состояния современных материалов и модельные подходы при моделировании свойств наномасштабных материалов (6 ч.) <p><i>Лабораторные занятия:</i></p> <ul style="list-style-type: none"> - Параллельные вычисления в классической молекулярной динамике (4 ч.) - Изучение параллельных режимов расчета электронной структуры в программе Quantum-ESPRESSO (4 ч.) - Исследование эффективности каждого типа распараллеливания в программе Quantum-ESPRESSO на примере расчета кристаллических соединений (4 ч.) 	ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина», физико-технологический институт, кафедра теоретической физики и прикладной математики.

		<p>-Исследование эффективности параллельной реализации молекулярно-динамического алгоритма Кара-Паринелло (4 ч.)</p> <p>- Применение параллельных вычислений для анализа данных молекулярно-динамического моделирования (4 ч.)</p>	
2.	Образовательная программа подготовки специалистов по специальности 140302 «Физика атомного ядра и частиц», по курсу учебной дисциплины «Материаловедение»	<p>Дополнение в уже существующий курс в виде новых лекций и лабораторных занятий, в т.ч. <i>лекции по темам:</i></p> <p>- физические свойства сильнокоррелированных магнитных материалов (6 ч.)</p> <p><i>Лабораторные занятия:</i></p> <p>- Решение модели Хаббарда на квадратной решетки в рамках теории динамического среднего поля (4ч.)</p> <p>- Расчет свойств реальных сильнокоррелированных систем в рамках теории динамического среднего поля (4 ч.)</p> <p>- Расчет свойств реальных сильнокоррелированных систем в рамках решения примесной модели Андерсона (4 ч.)</p> <p>- Рентгеновский фазовый анализ</p>	<p>ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина», физико-технологический институт, кафедра теоретической физики и прикладной математики.</p>

		<p>сильнокоррелированных материалов (4 ч).</p> <p>- Полнопрофильный анализ дифрактограммы сильнокоррелированных материалов (4 ч.)</p>	
3.	<p>Образовательная программа подготовки бакалавров по направлению 010600 «Прикладные математика и физика», по курсу учебной дисциплины «Информатика и применение компьютеров в научных исследованиях»</p>	<p>Дополнение в уже существующий курс в виде новых лекций и практических занятий, в т.ч. <i>лекции по темам:</i></p> <p>- Оптимизация распределения потоков команд и данных, используемых для численного моделирования свойств материалов с целью их эффективного использования на современных многопроцессорных кластерных системах (4ч.)</p> <p>- Параллельные вычисления на многопроцессорных системах (6ч.)</p> <p><i>Практические занятия:</i></p> <p>- Работа в операционной системе Linux и параллельные вычисления в среде MPI” (6 ч.)</p>	<p>ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина», физико-технологический институт, кафедра теоретической физики и прикладной математики.</p>
4.	<p>Образовательная программа для аспирантов и молодых преподавателей</p>	<p>Дополнение в уже существующий курс в виде новых лекций (для аспирантов и молодых преподавателей) <i>по темам:</i></p> <p>- Сильнокоррелированные системы в физике и технологии (2ч.)</p> <p>- Основные</p>	<p>ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина», физико-технологический институт, кафедра теоретической физики и прикладной</p>

		<p>приближения и подходы при моделировании физических свойств сильнокоррелированных систем (8ч.)</p> <p>-Метод функционала электронной плотности (6 ч.)</p> <p>- Экспериментальные методы исследования свойств сильнокоррелированных материалов (4 ч.)</p>	математики.
5.	<p>Основная образовательная программа подготовки бакалавров по направлению 010900.62 Прикладные математика и физика, профиль «Физика конденсированного состояния живых и неживых систем», а также подготовки бакалавров по направлению 140800 Ядерные физика и технологии, профиль «Физика конденсированного состояния» по курсу учебной дисциплины «Физические свойства уникальных сильнокоррелированных систем»</p>	<p>Новый курс в виде лекций (36ч.) и лабораторных работ (20ч.).</p> <p>Полная характеристика учебно-методического комплекса дана в отчете за предыдущий этап.</p>	<p>ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина», физико-технологический институт, кафедра теоретической физики и прикладной математики.</p>
6.	<p>Основная образовательная программа подготовки магистров по направлению 010900.68 Прикладные математика и физика, магистерская</p>	<p>Дополнение в уже существующий курс в виде новых лекций и лабораторных работ, в т.ч. <i>лекции по темам:</i></p> <p>- Параллельные вычисления при</p>	<p>ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина», физико-</p>

	<p>программа «Математическая физика и математическое моделирование» по курсу учебной дисциплины «Компьютерные технологии в науке».</p>	<p>моделировании электронной структуры сильнокоррелированных материалов на многопроцессорных системах (6 ч.) <i>лабораторные работы по темам:</i> - Изучение параллельных режимов расчета электронной структуры в программе Quantum-ESPRESSO (6ч.): 1.распараллеливание по к-точкам; 2.распараллеливание по зонам; 3.распараллеливание по плоским волнам. - Исследование эффективности каждого типа распараллеливания в программе Quantum-ESPRESSO на примере расчета кристаллических соединений (8ч.)</p>	<p>технологический институт, кафедра теоретической физики и прикладной математики.</p>
--	--	--	--

В качестве примера в приложении Б представлена разработанная участниками проекта основная образовательная программа высшего профессионального образования подготовки бакалавров по направлению 010900 – Прикладные математика и физика, по профилю «Физика конденсированного состояния живых и неживых систем». В этой программе результаты НИР настоящего проекта входят в виде дополнительных лекций и лабораторных работ в соответствующие лекционные курсы, а также в виде отдельного модуля «Физические свойства уникальных сильнокоррелированных систем».

Внедрение результатов НИР осуществлялось на основе разработанных научно-методических материалов. Авторами проекта были изданы учебные

пособия «Наночастицы, наноматериалы, нанотехнологии» и «Моделирование физических свойств наноматериалов на базе параллельных алгоритмов», приложение В. И как отмечалось выше, в рамках разработки основных образовательных программ подготовки бакалавров по направлениям 010900 Прикладные математика и физика и 140800 Ядерные физика и технология в учебный план был включен специализированный курс «Физические свойства уникальных сильнокоррелированных материалов» (приложение Г), программа и содержательная часть которого подробно представлены в отчете по проекту за 4 этап.

Результаты НИР могут быть внедрены образовательными учреждениями в субъектах РФ на основе разработанных программ и учебно-методических пособий, которые размещены на официальном сайте физико-технического факультета ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н.Ельцина» адресам: <http://fizteh.org/departments/tfpm/courses> и <http://fizteh.org/elibrary/nanomaterials>.

1.4 Экспериментальное исследование атомной структуры, оптических и др. свойств на основе Fe, Co, Mn, Si, Ge, Sb, Te

1.4.1 Термoeлектрические и термомагнитные свойства твердого раствора $Hg_{1-x}Co_xSe$ и сплава Гейслера $Fe_{2-x}V_{1+x}Al$

Твердые растворы на основе бесщелевых полупроводников $Hg_{1-x}M_xSe$, где М - магнитный 3d- ион (разбавленные магнитные полупроводники) и сплавы Гейслера $Fe_{2-x}V_{1+x}Al$ с составом вблизи стехиометрического $x=0$ вызывают устойчивый интерес среди специалистов в связи с проблемой спиновой поляризации тока. Хотя ферромагнитное упорядочение спинов в этих системах пока не достигнуто, они могут служить полезными модельными объектами для изучения природы обменного взаимодействия в материалах спинтроники.

За отчетный период проведено исследование специфики обменного взаимодействия свободных носителей заряда с неупорядоченными спинами 3d-ионов через его проявление в температурной зависимости термоэдс, а также в температурной и магнитолевой зависимости продольного эффекта Нернста-

Эттингсгаузена (НЭ). Исследования выполнены на образце твердого раствора $\text{Hg}_{1-x}\text{Co}_x\text{Se}$ с электронным типом проводимости ($x = 0.01$) и сплаве Гейслера $\text{Fe}_{2-x}\text{V}_{1+x}\text{Al}$ с дырочной проводимостью ($x = -0.04$).

Температурная зависимость термоэдс α для сплава Гейслера $\text{Fe}_{2.04}\text{V}_{0.96}\text{Al}$ имеет вид в соответствии с рисунком 17. Прямая демонстрирует смещенную вверх на величину $\alpha_{ex}^0 = 15 \text{ мкВ/К}$ зависимость $\alpha(T)$ при высоких T .

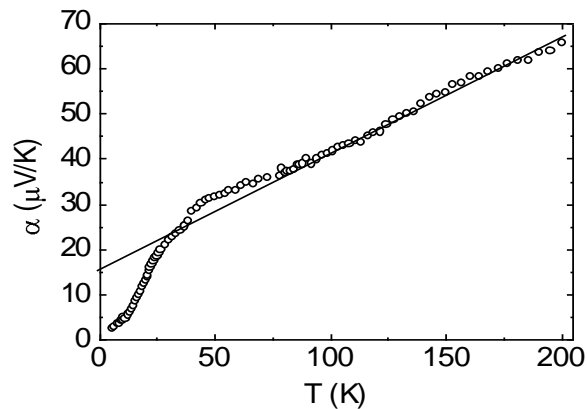


Рисунок 17 - Температурная зависимость термоэдс α для сплава Гейслера $\text{Fe}_{2.04}\text{V}_{0.96}\text{Al}$.

Температурная зависимость термоэдс α для твердого раствора $\text{Hg}_{0.99}\text{Co}_{0.01}\text{Se}$ имеет вид в соответствии с рисунком 18. Здесь прямая линия демонстрирует смещенную вверх на величину $\alpha_{ex}^0 = 10 \text{ мкВ/К}$ зависимость $\alpha(T)$ при высоких T .

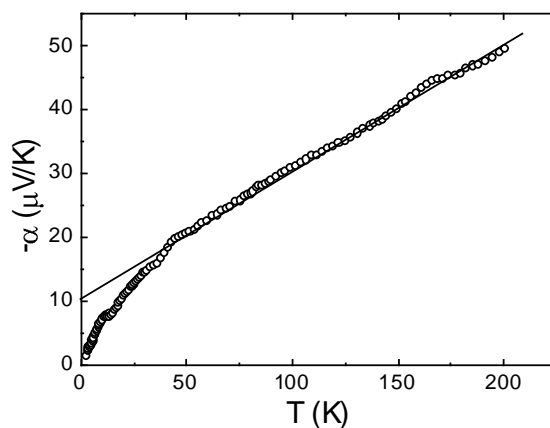


Рисунок 18 - Температурная зависимость термоэдс α для твердого раствора $\text{Hg}_{0.99}\text{Co}_{0.01}\text{Se}$

В соответствии с рисунками 17 и 18 в определенном интервале температур зависимость $\alpha(T)$ близка к линейной. Однако, необходимо отметить отсутствие характерной для вырожденного газа экстраполяции этих прямых к нулю при $T \rightarrow 0$. Это означает наличие независящего от температуры вклада в термоэдс вырожденного газа носителей тока, который интерпретируется как обменная составляющая термоэдс α_{ex} . Она является следствием обменного взаимодействия электронов или дырок с неупорядоченными спинами $3d$ -ионов, что обеспечивает дополнительный вклад в рассеяние носителей заряда за счет процессов с переворотом спина. Для описания обменной термоэдс можно пользоваться интерполяционной формулой Кондо [7]:

$$\alpha_{ex} = \frac{\alpha_{ex}^0 T}{T + T_0}, \quad (1)$$

где характерная температура T_0 связана с локальным магнитным полем H_0 ближайшего окружения магнитного иона, определяющим зеемановское расщепление его основного состояния в отсутствие внешнего магнитного поля:

$$T_0 = 2\mu_B H_0 / k_B. \quad (2)$$

Согласно формуле (1) при $T \gg T_0$ независимо от температуры $\alpha_{ex} = \alpha_{ex}^0$, а при $T \ll T_0$

$$\alpha_{ex} = \alpha_{ex}^0 \frac{T}{T_0}. \quad (3)$$

Нетрудно видеть, что оба этих предельных случая соответствуют данным рисунков 17 и 18.

На следующем этапе нами исследовались терромагнитные свойства разбавленного магнитного полупроводника $\text{Hg}_{0.99}\text{Co}_{0.01}\text{Se}$ и сплава Гейслера $\text{Fe}_{2.04}\text{V}_{0.96}\text{Al}$.

Отличительной особенностью обменного вклада в термоэдс является его подавление магнитным полем H , поскольку увеличение зеемановского расщепления основного состояния магнитного иона приводит с ростом H к уменьшению вероятности рассеяния носителей тока, сопровождающегося изменением проекции спина магнитного иона. Зависимость величины изменения термоэдс $\Delta\alpha/\alpha_0 = \alpha(H) - \alpha(0) / \alpha(0)$ от магнитного поля H для твердого раствора $\text{Hg}_{0.99}\text{Co}_{0.01}\text{Se}$ и сплава $\text{Fe}_{2.04}\text{V}_{0.96}\text{Al}$ может быть представлена в соответствии с рисунками 19 и 20.

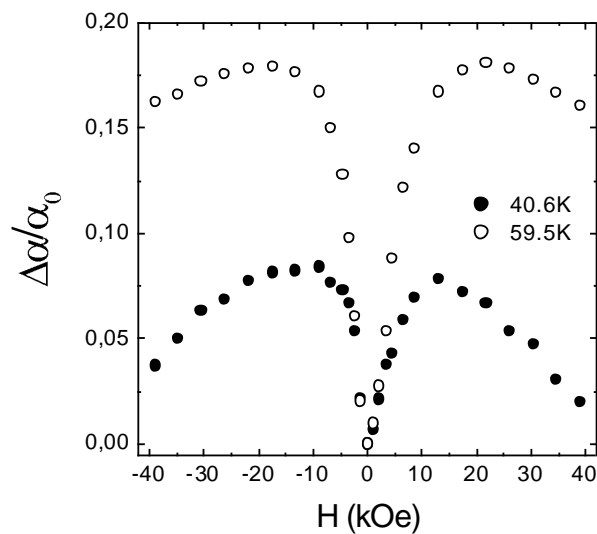


Рисунок 19 - Зависимость величины изменения термоэдс $\Delta\alpha/\alpha_0 = \alpha(H) - \alpha(0) / \alpha(0)$ от магнитного поля H для твердого раствора $\text{Hg}_{0.99}\text{Co}_{0.01}\text{Se}$

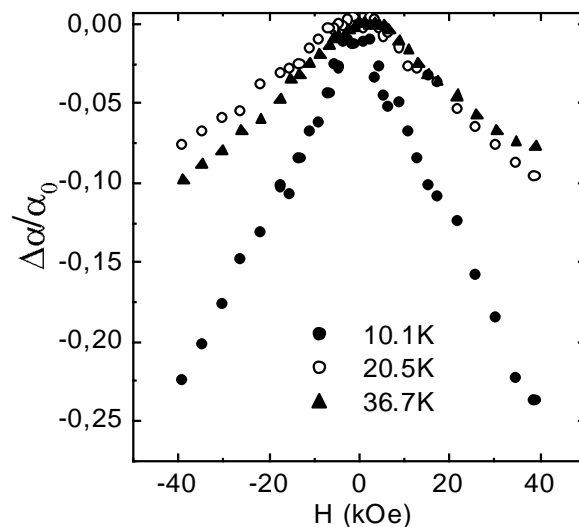


Рисунок 20 - Зависимость величины изменения термоэдс $\Delta\alpha/\alpha_0 = \alpha(H) - \alpha(0) / \alpha(0)$ от магнитного поля H для сплава $\text{Fe}_{2.04}\text{V}_{0.96}\text{Al}$

Результаты измерений продольного эффекта НЭ (изменения термоэдс в магнитном поле) убедительно демонстрируют эффект подавления обменной составляющей в рассматриваемых кондовских системах, который проявляется как уменьшение измеряемой термоэдс с увеличением магнитного поля (отрицательный эффект НЭ). В соответствии с рисунком 19 можно говорить о том, что для твердого раствора $\text{Hg}_{0.99}\text{Co}_{0.01}\text{Se}$ уменьшение $\alpha(H)$ наблюдается на фоне положительного эффекта НЭ, что приводит в результате к максимуму зависимости $\Delta\alpha(H)/\alpha_0$. Положительный эффект НЭ при переходе от классически слабых магнитных полей ($\omega_c\tau \ll 1$, ω_c - циклотронная частота, τ - время релаксации) к классически сильным ($\omega_c\tau \gg 1$) можно объяснить в рамках известной теории для этого термоманитного эффекта, справедливой для вырожденного газа носителей тока и произвольного (упругого или неупругого) механизма рассеяния. В сплаве $\text{Fe}_{2.04}\text{V}_{0.96}\text{Al}$ подвижность дырок $\sim 10\text{см}^2/\text{Вс}$, что на два или даже три порядка ниже, чем в твердом растворе. Поэтому параметр $\omega_c\tau$ остается малым, и классические эффекты роста термоэдс незначительны. В результате подавление обменного вклада в термоэдс для образца $\text{Fe}_{2.04}\text{V}_{0.96}\text{Al}$ наблюдается в “чистом виде” в соответствии с рисунком 20. Оценки показывают, что при условии полного подавления вклада Кондо термоэдс в данном сплаве может уменьшиться более чем на 60%.

Необходимо подчеркнуть, что измерения продольного эффекта НЭ в твердом растворе $\text{Hg}_{1-x}\text{Co}_x\text{Se}$ и сплаве Гейслера $\text{Fe}_{2-x}\text{V}_{1+x}\text{Al}$ выполнены впервые.

Таким образом, результаты проведенного исследования показывают, что в термоэдс и продольный эффект НЭ разных по способу получения систем (твердые растворы и сплавы), содержащих в решетке локальные магнитные моменты, существенный вклад вносит обменное взаимодействие носителей заряда со спинами магнитных ионов. Установлено, что это взаимодействие является обменным взаимодействием кондовского типа.

1.4.2 Фотолюминесценции и возбуждения фотолюминесценции твердых растворов $Zn_{1-x}Co_xO$, $Zn_{1-x}Ni_xO$ и $Zn_{1-x}Mn_xO$

Полупроводники $ZnO:3d$ активно исследуются в последнее время для поиска ферромагнитного упорядочения с $T_c > 300K$, предсказанного теоретически. Ферромагнитное упорядочение наблюдалось в $ZnO:Mn$ и $ZnO:Co$. В ходе исследования обнаружилось отличие оптических свойств $ZnO:3d$, особенно заметное в $Zn_{1-x}Mn_xO$, по сравнению с соединениями II-VI: $3d$. В работе [8] было предложено считать, что $ZnO:3d$ могут быть отнесены к малоизученным материалам, свойства которых определяются сильной d-p гибридизацией. Убедительные доводы о сильной d-p гибридизации в $Zn_{1-x}Mn_xO$ были получены из наблюдения фотолюминесценции.

Для соединения $ZnO:Co$ было показано, что существенное значение играет положение акцепторного уровня иона Co^{2+} (0/-) относительно дна зоны проводимости. Электронные переходы с переносом заряда и соответственно донорный (0/+) и акцепторный (0/-) энергетические уровни 3d примесей в полупроводниках II-VI представлены в соответствии с рисунком 21.

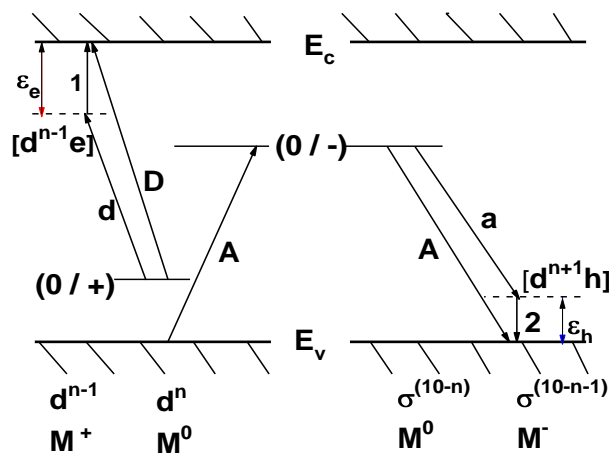


Рисунок 21 - Изображение донорных (0/+) и акцепторных (0/-) уровней 3d-примесей на одноэлектронной схеме. Показаны переходы с ионизацией примеси (D и A) и переходы в водородоподобные состояния (d и a). Переходами 1 и 2 описывается отрыв водородоподобного носителя в разрешённую зону. Энергия ионизации электрона для донорного экситона $[d^{n-1}e]-\epsilon_e$, а дырки для акцепторного экситона $[d^{n+1}h]-\epsilon_h$.

Эти уровни можно понимать как антисвязывающие состояния, возникающие в результате d-p гибридизации. Связывающие состояния в результате d-p гибридизации попадают в валентную полосу. На данном этапе проекта мы пытались выявить существование такого уровня относительно дна зоны проводимости оптическими методами.

Измеренные спектры фотолюминесценции и возбуждения фотолюминесценции монокристаллов ZnO:Ni при температуре 90K могут быть представлены в соответствии с рисунками 22 и 23.

В спектре фотолюминесценции наблюдаются два пика, обусловленные переходами через донорный и акцепторный уровни с переносом заряда иона Ni^{2+} при энергиях 1.85 eV, 2.20 eV, соответственно. Эти уровни дают широкие полосы в спектрах поглощения света и фотолюминесценции. Положение высокоэнергетических краёв двух полос фотолюминесценции позволяет оценить положение донорного и акцепторного уровней иона Ni^{2+} относительно краёв разрешённых зон. Спектры возбуждения пиков люминесценции имеют особенности в области E_g и при $\hbar\omega$ больших E_g наблюдается значительный рост интенсивности возбуждения с некоторыми особенностями. Этот подъём аналогичен характеру спектра возбуждения, наблюдаемому ранее для $\text{Zn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}$. Мы связываем такой характер спектра возбуждения с очень сильной d-p гибридизацией в ZnO, легированным Mn.

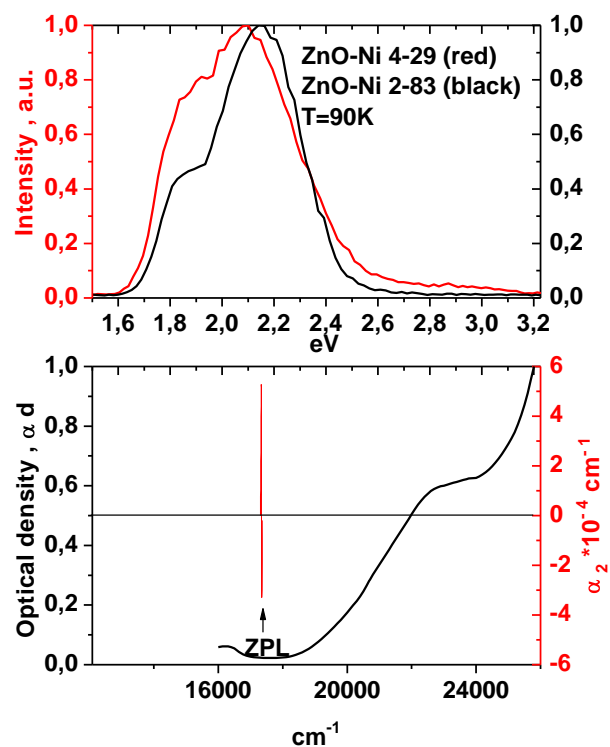


Рисунок 22 - Верхняя часть- спектры фотолюминесценции для двух образцов ZnO:Ni с концентрациями 0.03 вес% ((красный) и 0.1 вес% (черный), T=90K. Нижняя часть – спектр поглощения в области переноса заряда, чёрная кривая [9], Головная линия спектра электропоглощения ZnO:Ni (красная кривая) – [10].

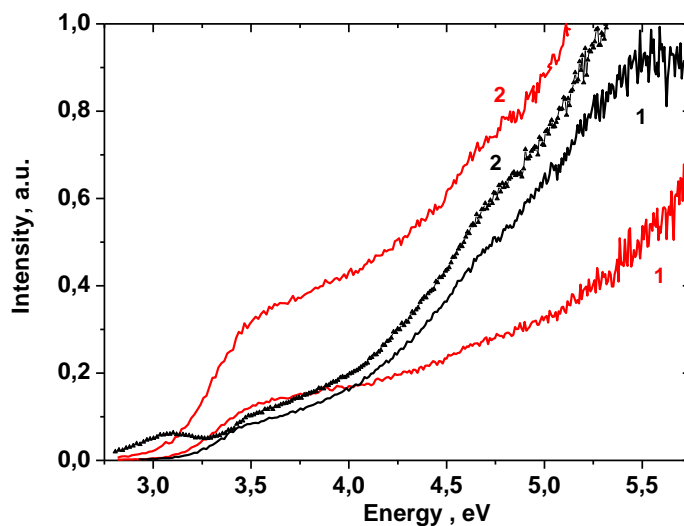


Рисунок 23 - Спектры возбуждения фотолюминесценции ZnO-Ni 4-29 (красная) ZnO-Ni 2-83 (черная), энергии излучения $E_{em}=2.2\text{eV}$ (1) и $E_{em}=1.84\text{ eV}$ (2), T=90K

Для монокристаллов ZnO:Co измеренные спектры фотолюминесценции и возбуждения фотолюминесценции при температуре 90К могут быть представлены в соответствии с рисунками 24 и 25.

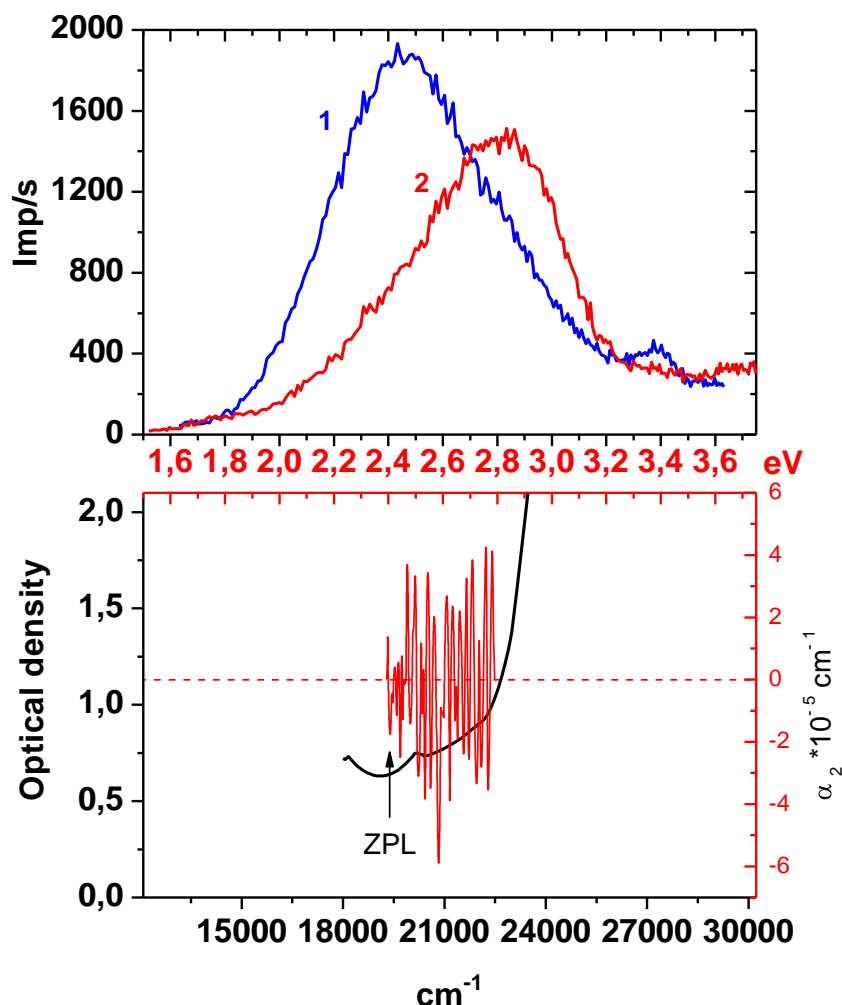


Рисунок 24 - Спектры фотолюминесценции для двух образцов ZnO:Co 1- концентрация (0.07%) T=90K E_{exc}=4.13eV 2- ZnO-Co (0.7%) T=90K E_{exc}=4.47eV, нижняя часть – чёрная кривая, спектр поглощения [9], красная – спектр электропоглощения [11]

При низкой концентрации кобальта наблюдается широкая полоса фотолюминесценции с максимумом 2.4 eV, которая связана с глубокими дефектами. Видна также краевая фотолюминесценция в области 3.37 eV, обусловленная экситонами. С увеличением концентрации Co на порядок тушится глубокая и краевая люминесценция и появляется широкая полоса с максимумом 2.85 eV, обусловленная наличием Co.

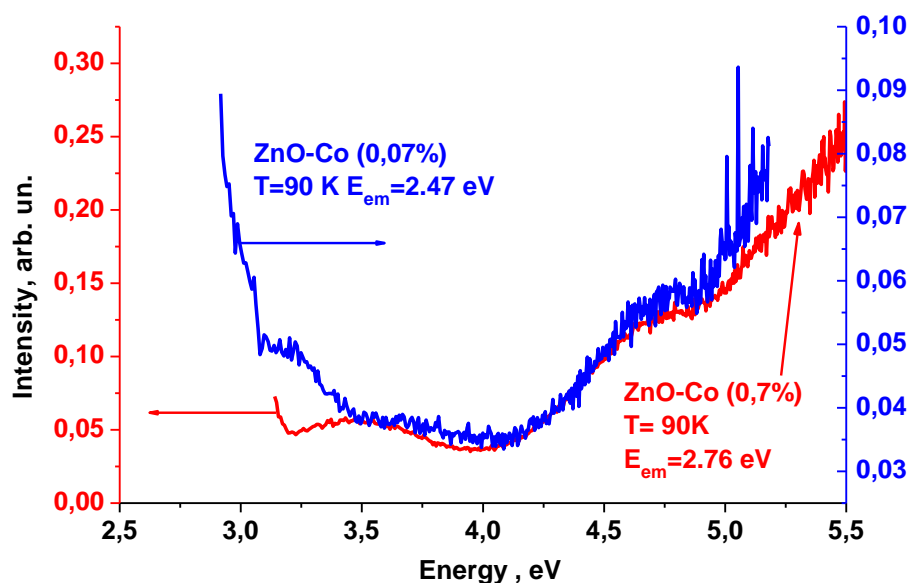


Рисунок 25 - Спектры возбуждения фотолуминесценции ZnO:Co

В спектре возбуждения фотолуминесценции ZnO:Co виден явный рост интенсивности с ростом энергии возбуждающего света. При этом четко видна особенность в области 4.5 эВ. Наличие особенностей в спектрах возбуждения фотолуминесценции для ZnO:Co, ZnO:Ni позволяет заключить, что в валентной зоне за счёт сильной гибридизации возникают особенности в спектре энергетических состояний, через которые эффективно возбуждается изучаемая фотолуминесценция.

Во втором случае спектры регистрировались с использованием синхротронного излучения при температурах 300K и 8K. Время-интегрированные, время-разрешенные спектры и кинетика затухания фотолуминесценции (ФЛ) в диапазоне 1.5 - 6.0 эВ, время-разрешенные спектры возбуждения ФЛ (3.7 - 21.0 эВ) были измерены при температуре 8.2 K с использованием синхротронного излучения на станции SUPERLUMI (HASYLAB, DESY). Система регистрации состояла из 0.3 m монохроматора ARC Spectra Pro-300i и ФЭУ R6358P (Hamamatsu) с мультищелочным фотокатодом. В отдельных экспериментах при записи спектров ФЛ без временного разрешения использовалась CCD-камера. Одновременно с записью время-интегрированного спектра ФЛ записывались также время-

разрешенные спектры в двух временных окнах: для быстрого компонента задержка относительно начала возбуждающего импульса СИ составляла $\delta t_1=0.6$ нс, ширина окна $\Delta t_1=2.3$ нс, для медленного компонента задержка $\delta t_2=58$ нс, ширина окна $\Delta t_2=13.5$ нс. Параметры временных окон выбирались, исходя из формы кинетики затухания ФЛ. Спектры возбуждения ФЛ были нормированы на равное число падающих на образец фотонов с помощью салицилата натрия. Временное разрешение регистрирующей системы не превышало 1 нс. Период следования импульсов возбуждения СИ составлял 96 нс.

Измеренные на DESY спектры фотолюминесценции и возбуждения фотолюминесценции для ZnO:Ni and ZnO:Co могут быть представлены в соответствии с рисунками 26 и 27.

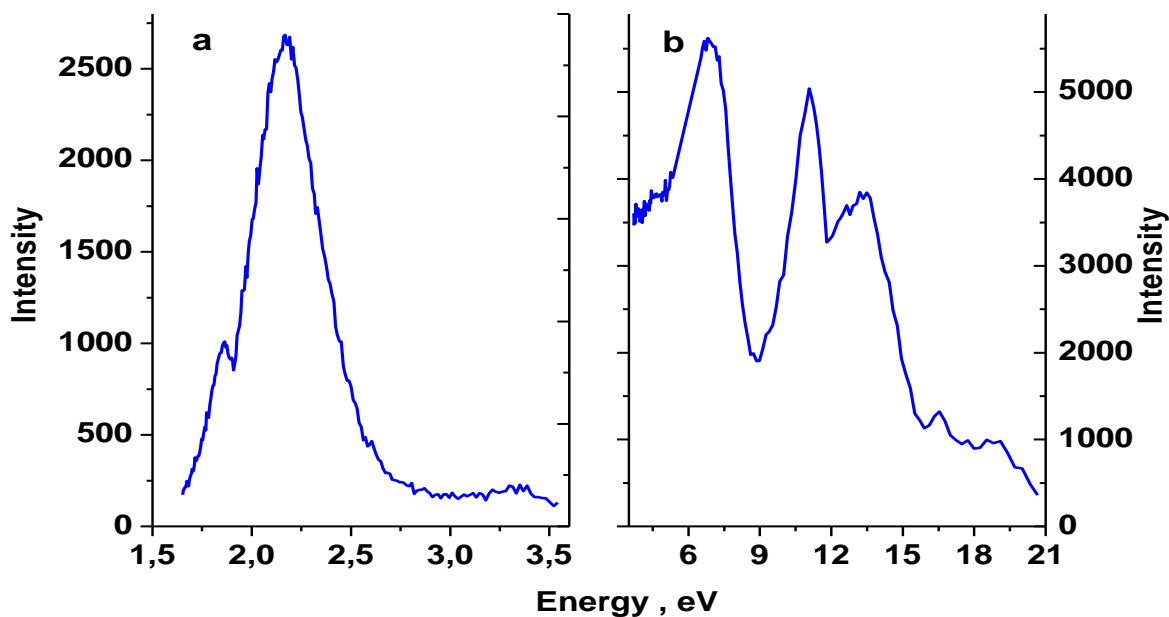


Рисунок 26 - (а) спектр фотолюминесценции, $E_{\text{возб}} = 6,9$ эВ
 (б) спектр возбуждения фотолюминесценции для ZnO:Ni
 с концентрацией Ni 0.1 вес% , $E_{\text{изл}} = 2.17$ эВ, $T=8$ К

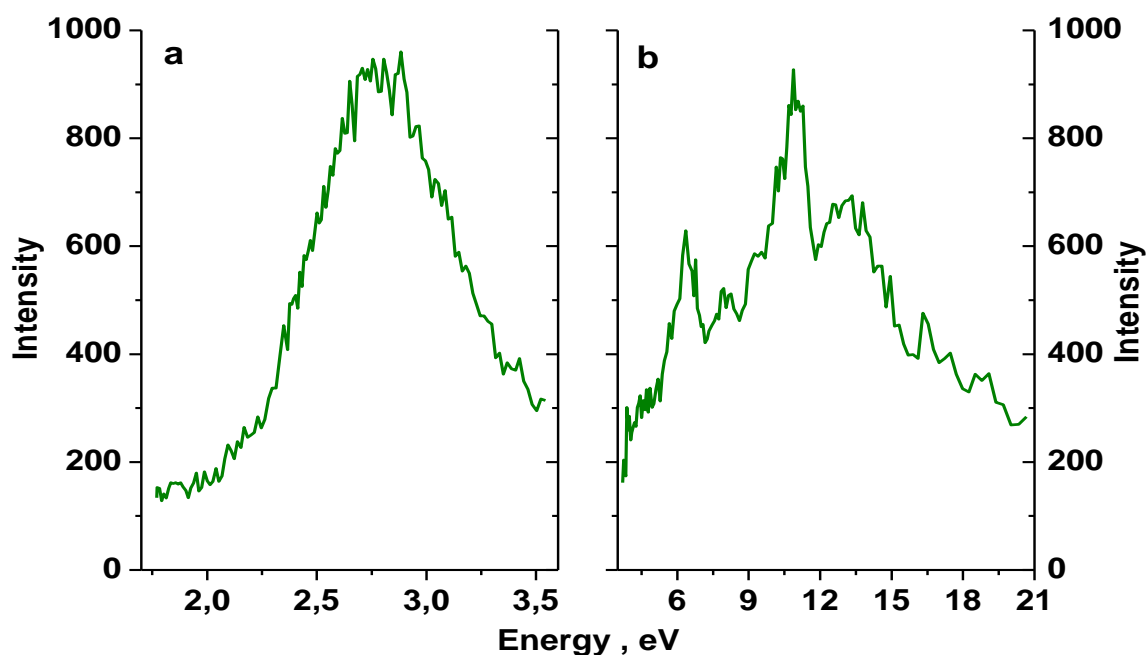


Рисунок 27 - (а) спектр фотолюминесценции, $E_{\text{возб}} = 10,7$ эВ,
(b) спектр возбуждения фотолюминесценции.

$E_{\text{изл}} 2.75$ эВ для ZnO:Co (0,7 %). $T=8$ К

В соответствии с рисунком 26а можно выделить два пика в спектре PL при энергиях 1.85eV и 2.17eV. Коротковолновые края этих полос, приблизительно 2.1 eV и 2.70 eV, что близко к энергиям начала полос переноса заряда в спектре поглощения для ZnO:Ni. В соответствии с рисунком 27а в спектре PL ZnO:Co наблюдается одна широкая полоса с максимумом при энергии 2.8 eV, коротковолновый край которой близок к краю основного поглощения в ZnO 3.43 eV.

Особый интерес представляет структура спектра возбуждения для ZnO:Ni и ZnO:Co. Наблюдается рост интенсивности и пик в спектре возбуждения при энергии 6 эВ как для ZnO:Ni так для ZnO:Co. Также наблюдаются близкие по положению пики при 10,5 эВ и 13.5 эВ.

Измеренные на DESY спектры фотолюминесценции и возбуждения фотолюминесценции нанопорошка $\text{Zn}_{0.99}\text{Mn}_{0.01}\text{O}$ и монокристалла $\text{Zn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}$ ($x = 0.0016$) могут быть представлены в соответствии с рисунками 28, 29, 30.

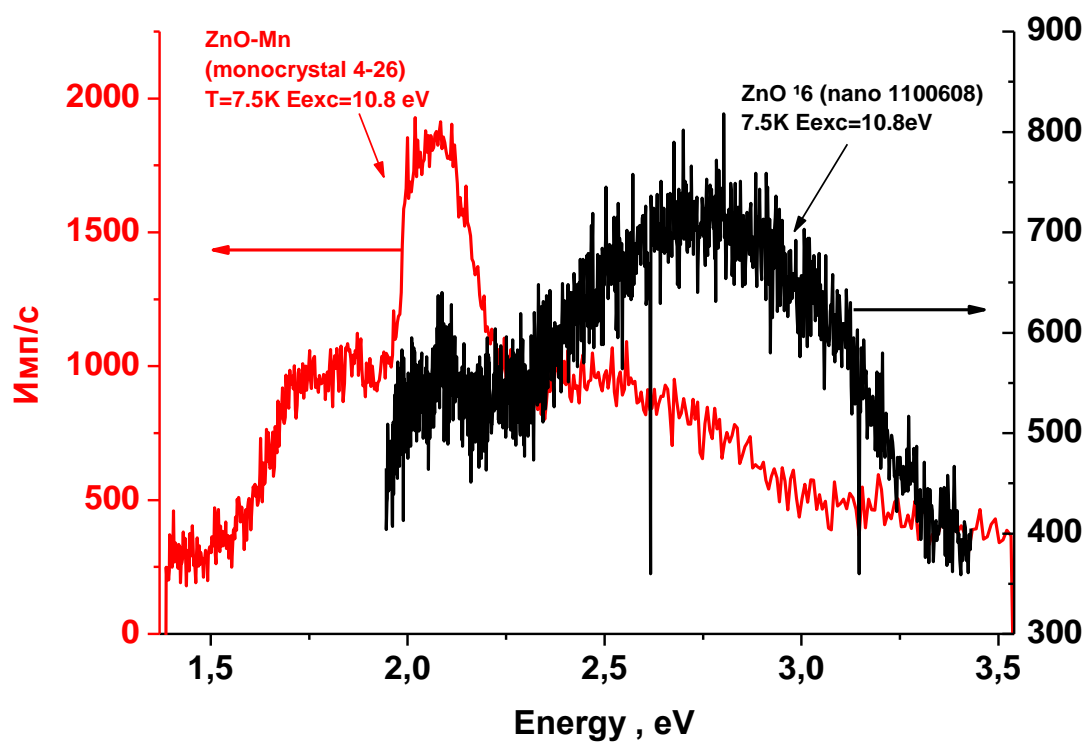


Рисунок 28 - Спектры люминесценции $\text{Zn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}$

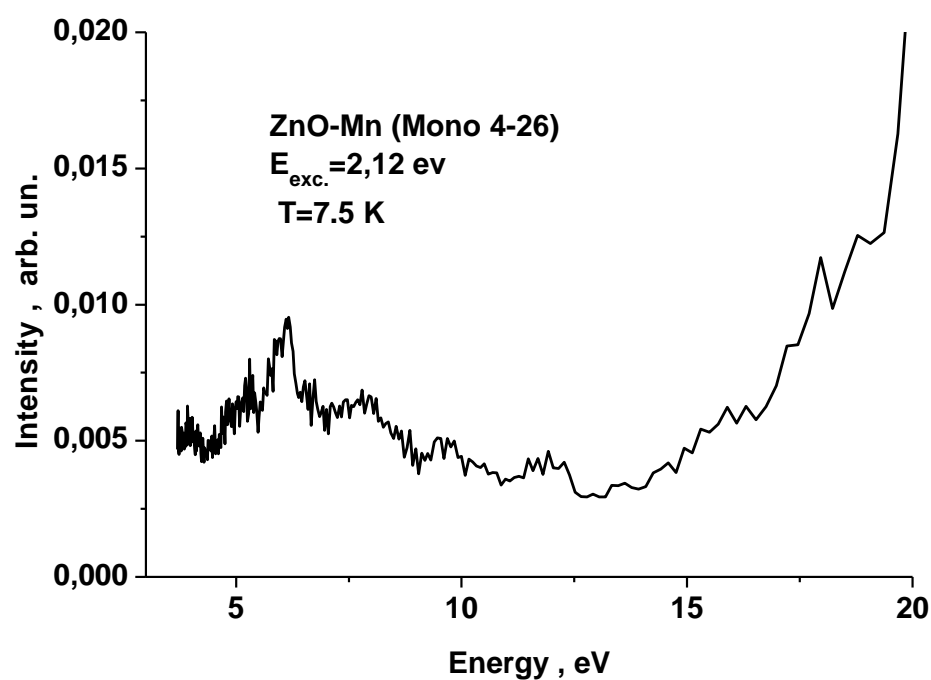


Рисунок 29 - Спектр возбуждения фотолюминесценции монокристалла $\text{Zn}_{0,9984}\text{Mn}_{0,0016}\text{O}$

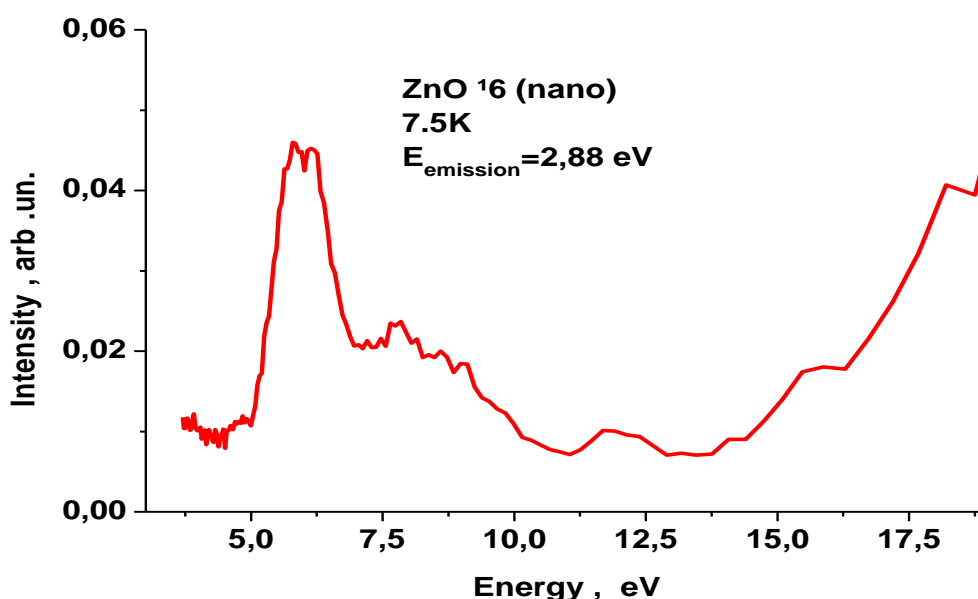


Рисунок 30 - Спектр возбуждения фотолюминесценции нанопорошка $\text{Zn}_{0,99}\text{Mn}_{0,01}\text{O}$

Видно, что спектр возбуждения фотолюминесценции $\text{Zn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{O}$ содержит пик в области 6 эВ и слабую особенность в области 8 эВ на фоне спада. В области 15 эВ начинается значительный подъем интенсивности возбуждения. Для нас важно наличие пика при 6 эВ, что совпадает со спектрами для ZnO:Ni и ZnO:Co . Это можно понимать, как проявление общего свойства оксидных соединений ZnO:3d в результате сильной p-d гибридизации. В этом случае в валентной зоне возникают связывающие состояния, положение которых формируется главным образом за счет p-состояний кислорода и слабо меняется за счет легирующего компонента. Высокоэнергетические особенности в спектре возбуждения фотолюминесценции формируются за счет эффекта фотонного умножения, когда энергия первичного носителя в зоне превышает ширину запрещенной зоны. В результате за счет Оже эффекта возникают дополнительные электронно-дырочные пары.

Таким образом, спектроскопия возбуждения фотолюминесценции позволяет получать новую информацию о глубоких состояниях в валентной зоне полупроводников ZnO:3d , сформированных в результате очень сильной

гибридизации. Это позволяет отнести оксидные соединения ZnO:3d к системам с эффектами сильных корреляций.

2 Подготовка кадров высшей квалификации

Во время выполнения пятого этапа проекта Катанин Андрей Александрович представил диссертацию на соискание ученой степени доктора физико-математических наук на тему «Флуктуационные эффекты в низкоразмерных локализованных и зонных магнетиках». Защита 17 ноября 2011 года в диссертационном совете Д 501.001.70 при Московском государственном университете имени М.В.Ломоносова.

3 Список статей, опубликованных членами творческого коллектива за отчетный период

- 1 Knyazev Yu.V. Effect of Cu-doping on the electronic structure and optical properties of LaNi_5 /Yu.V. Knyazev, A.V. Lukoyanov, Yu.I. Kuz'min, A.G. Kuchin//Journal of Alloys and Compounds – 2011. – V.509. - №17. - P.5238-5241.
- 2 Tsiovkin Yu.Yu. Electrical resistivity of pure transuranium metals under pressure/ Yu. Yu. Tsiovkin, A. V. Lukoyanov, A. O. Shorikov, L. Yu. Tsiovkina, A. A. Dyachenko, V. B. Bystrushkin, M. A. Korotin, V. I. Anisimov, V. V. Dremov//Journal of Nuclear Materials – 2011. – Vol.413. – P.41-46.
- 3 Князев Ю. В. Оптические свойства и электронная структура интерметаллических соединений $\text{YNi}_{5-x}\text{Cu}_x$ /Ю. В. Князев, А. В. Лукоянов, Ю. И. Кузьмин, А.Г.Кучин//Оптика и спектроскопия – 2011. Vol.111. - № 2. - С.348-353.
- 4 Mazurenko V.V. Simulation of the Electronic Structure of Simple Oxides BeO and SiO_2 and Complex Oxides Be_2SiO_4 and $\text{Be}_2\text{SixGe}_{1-x}\text{O}_4$ with the Phenacite Structure/ V. V. Mazurenko, A. N. Rudenko, Ya. O. Kvashnin, V. G. Mazurenko, Yu. N. Novoselov, V. A. Pustovarov, A. I. Kukharensky, S. O. Cholakh//JETP – 2011. - V.112. - N.5. - P.877-883.
- 5 McLeod J. A. Nature of electronic states involved in the chemical bonding and superconductivity at high pressure in SnO /J. A. McLeod, A. V. Lukoyanov, E. Z. Kurmaev, L. D. Finkelstein, A. Moewes//Письма в ЖЭТФ – 2011. – Т.94. - №2. - С.

146-150.

6 Azamat D. V. EPR spectroscopy of weak exchange interactions between Co^{2+} ions in ZnO/D. V. Azamat, A. Dejneka, V. A. Trepakov, L. Jastrabik, M. Fanciulli, V. Y. Ivanov, M. Godlewski, V. I. Sokolov, J. Rosa, A. G. Badalyan//Phys. Status Solidi RRL – 2011. – Vol.5. - N4. – P.138–140.

4 Список работ коллектива, направленных в журналы для публикации

- 1) V.V. Mazurenko, S.N. Isakov, M.V. Valentuyk, A.N. Rudenko, A.I. Lichtenstein “Orbital-selective conductivity of Co adatom on the Pt(111) surface”, направлена для публикации в журнал Physical Review Letters (arXiv:1106.3702).
- 2) “The electronic structure and optical spectroscopy studies of HoNi_5 and ErNi_5 compounds doped with Cu”, Yu.V. Knyazev, A.V. Lukoyanov, Yu.I. Kuz'min, A.G. Kuchin, sent to JAC.

5 Доклады членов творческого коллектива на конференциях

- 1) Валентюк М.В., Исаков С.Н., Мазуренко В.В., «Эффекты перенормировки спектральной функции в системе атомов Co на подложке Pt(111)», Информационный бюллетень Семнадцатой Всероссийской научной конференции студентов-физиков, г.Екатеринбург, 25 марта - 1 апреля 2011 г., с. 93.
- 2) Кашин И.В., «Развитие программной инфраструктуры для решения уравнений динамического среднего поля методом точной диагонализации», Информационный бюллетень Семнадцатой Всероссийской научной конференции студентов-физиков, г.Екатеринбург, 25 марта - 1 апреля 2011 г., с. 102.
- 3) Давыдова А.О., «Изучение магнитных свойств сильнофрустрированного магнетика $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$ », Информационный бюллетень Семнадцатой Всероссийской научной конференции студентов-физиков, г.Екатеринбург, 25 марта - 1 апреля 2011 г., с.281.
- 4) A. N. Rudenko, F.J. Keil, M.I. Katsnelson, A.I. Lichtenstein, Adhesion of graphene on muscovite mica: an ab initio study, Graphene-2011, Bilbao, Spain, 11-14 April 2011.

Заключение

(Итоги проведенной работы по проекту в целом)

Все результаты проекта могут быть разделены на методические, практические и результаты, связанные с развитием программной инфраструктуры. Перечислим наиболее важные из них.

Методические результаты проекта:

1. Разработан кластерный LDA+DMFT метод для корректного описания многочастичных эффектов в сильнокоррелированных системах со значительными эффектами межузельных корреляций при конечных температурах. Численная схема позволяет рассчитывать сложные двухчастичные корреляционные функции, что позволяет проводить прямое сравнение с результатами экспериментов.
2. Предложен многочастичный метод расчета спинового и орбитального вкладов в анизотропное обменное взаимодействие. Разработанный метод позволяет корректно учитывать эффекты спин-орбитального взаимодействия при описании магнитных свойств низкоразмерных квантовых систем.
3. Разработаны научно-методические материалы к учебно-методическому комплексу "Физические свойства уникальных сильнокоррелированных систем" для физических и материаловедческих специальностей

Программная инфраструктура:

4. Создан объектно-ориентированный программный комплекс, объединяющий первопринципные методики описания свойств основного состояния современных материалов и модельные подходы. Комплекс интегрирован в сеть Интернет, что позволяет его использовать как для научных, так и для учебных целей.

Практические результаты проекта:

5. Предложена модель неоднородной спиновой спирали, которая позволила впервые с единых позиций описать орторомбические манганиты $TbMnO_3$ и $HoMnO_3$, в которых ферроэлектрический эффект имеет различную микроскопическую природу.
6. Комплексные экспериментальные и теоретические исследования семейства мультиферроиков $Y_{1-x}Lu_xMnO_3$ ($0 < x < 1$) позволили получить доказательства

существования значительного спин-решеточного взаимодействия в этих системах.

7. Предложены многочастичные электронные и спиновые модели сильнофрустрированных низкоразмерных квантовых магнетиков $\text{BaCuSi}_2\text{O}_6$, BaVSi_2O_7 , $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$, $\text{Cu}_3\text{V}_2(\text{OH})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$.
8. Для соединения FeSi и системы твердых растворов $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$ предложена модель коррелированного зонного изолятора, позволившая впервые правильно воспроизвести весь спектр экспериментальных данных.
9. Впервые в рамках квантового гамильтониана с использованием теории линейного отклика проведено реалистичное моделирование проводимости отдельных атомов кобальта на поверхности $\text{Pt}(111)$. Предсказанная в численном эксперименте сильная орбитальная поляризация спектра проводимости дает возможность манипулирования отдельными $3d$ состояниями атома кобальта.
10. Предложены и решены многочастичные модели высокотемпературных сверхпроводников на основе FeAs -соединений.
11. Впервые проведены измерения продольного эффекта НЭ в твердом растворе $\text{Hg}_{1-x}\text{Co}_x\text{Se}$ и сплаве Гейслера $\text{Fe}_{2-x}\text{V}_{1+x}\text{Al}$. Показано, что в термоэдс и продольный эффект НЭ разных по способу получения систем (твердые растворы и сплавы), содержащих в решетке локальные магнитные моменты, существенный вклад вносит обменное взаимодействие носителей заряда со спинами магнитных ионов. Установлено, что это взаимодействие является обменным взаимодействием кондовского типа.
12. Методом спектроскопии возбуждения фотолюминесценции получена новая информация о глубоких электронных состояниях в валентной зоне материалов спинтроники на основе полупроводников ZnO:3d , сформированных в результате очень сильной гибридизации.

Отличительной чертой данного проекта является развитие совершенно нового подхода к организации процесса научных исследований. Для описания и прогнозирования свойств материалов для реальных технологических приложений моделирование проводилось в широком диапазоне масштабов времени и

пространства. Это стало возможным благодаря интеграции и оптимизации существующих методов и расчетных схем, и созданию на их основе универсальных программных комплексов. Все результаты являются новыми, соответствуют мировому уровню и опубликованы в ведущих зарубежных журналах с высоким показателем impact-factor. Одна из публикаций была отмечена редактором журнала Physical Review B.

Сформирован жизнестойкий научный коллектив с гарантированным притоком студентов и с большим научным потенциалом, большинство членов которого молодые ученые до 35 лет.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

- 1 Yu X.Z. Real-space observation of a two-dimensional skyrmion crystal/X. Z. Yu, Y. Onose, N. Kanazawa, J. H. Park, J. H. Han, Y. Matsui, N. Nagaosa, Y. Tokura//Nature (London) – 2010. – Vol.465. – P.901- 904.
- 2 M. Richardson Crystal Structure Refinements of the B 20 and Monoclinic Polymorphs of FeGe // Acta Chemica Scandinavica -1967. –Vol.21. –P.753-760.
- 3 Mattheiss L.F. Band structure and semiconducting properties of FeSi/ L.F. Mattheiss, D. R. Hamann// Physical Review B -1993. –Vol.47. –P.13114-13119.
- 4 Klein M. Evidence for Itineracy in the Anticipated Kondo Insulator FeSi: A Quantitative Determination of the Band Renormalization / M. Klein, D. Zur, D. Menzel, J. Schoenes, K. Doll, J. Röder, and F. Reinert// Physical Review Letters - 2008. –Vol.101. -№046406. –P.1-4.
- 5 Manyala N. Large anomalous Hall effect in a silicon-based magnetic semiconductor/ N. Manyala, Y. Sidis, J. F. DiTusa, G. Aeppli, D. P. Young, and Z. Fisk// Nature Materials -2004. –Vol.3. –P.255-262.
6. Manyala N. Doping a semiconductor to create an unconventional metal N. Manyala, J. F. DiTusa, G.Aeppli, A. P.Ramirez//Nature-2008.–Vol.454.–P.976-980.
- 7 J. Kondo, in Solid State Physics, Vol. 23, edited by H. Ehrenreich, F. Seitz, and D. Turnbull (Academic, New York, 1969), P.1-183.
- 8 Dietl T. Hole states in wide band-gap diluted magnetic semiconductors and oxides// Physical Review B -2008. –Vol.77. -№085208. –P.1-6.
- 9 H. A. Weakliem H.A. Optical spectra of Ni(2+), Co(2+) and Cu(2+) in tetrahedral sites in crystals// J. Chem. Phys. – 1962. – Vol.36. P.2117-2140.
- 10 Соколов В.И. Экситоны, связанные с Ni в кристаллах ZnO и CdS/ В.И. Соколов, А.Н. Мамедов, А.Н. Резницкий, Г.А. Емельченко, Л.Г. Колинова//Физика твердого тела – 1985. – Vol.27. – С.3319-3326.
- 11 Груздев Н.Б. Донорный экситон кобальта и его взаимодействие с колебаниями решётки в полупроводниковом кристалле ZnO:Co/Н.Б.Груздев, В. И. Соколов, Г.А.Емельченко//Физика низких температур-2009.–Т.35.-С.109-115.